Università degli Studi di Pisa
Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali
Corso di Laurea in Fisica
A. A. 1999/2000

Tesi di Laurea

Nuova espansione esatta per una classe di sistemi ordinati e disordinati su reticolo generico.

Candidato
Andrea SPORTIELLO

Relatore
Prof. Sergio CARACCIOLO

. . . finding a good question
is more difficult
than finding an answer.

Giorgio Parisi
Trieste – Abdus Salam ICTP – 24^{th} May 2000
1999 Dirac Medal Award Ceremony

Questa tesi è stata redatta in parte su un computer Power Macintosh G3, in parte su un computer Macintosh Performa 6200, per mezzo del software OzTeX 4.0, di Andrew Trevorrow, ottimizzato con le librerie dell'American Mathematical Society, e dell'editor per LaTeX Alpha 7.2, di Pete Keleher. Le figure sono state realizzate per mezzo del software Freehand 7.0.1, di proprietà della Macromedia Inc. I grafici di funzione sono stati realizzati per mezzo dell'accessorio di scrivania Calcolatrice Grafica, di Ron Avitzur. Si ringraziano Tobias Oetiker e l'AMS per il supporto manualistico.

Indice

Introduzione.

Questo lavoro di tesi si propone di studiare una classe di modelli di meccanica statistica, che presentino il fenomeno della transizione di fase, al fine di fornire nuovi strumenti teorici per l'analisi delle quantità di interesse fisico nell'intorno della regione critica. Esso in particolare esamina il metodo che permise a Kac e Ward di riottenere, come caso particolare, l'espressione analitica per l'energia libera nel modello di Ising su reticolo bidimensionale quadrato, in accordo con la celebrata soluzione già ottenuta da Onsager. Quindi ne espone una estensione, a reticoli generici ed a funzioni di correlazione di un numero arbitrario di variabili. Infine analizza alcune conseguenze dei risultati ottenuti, e li inquadra nell'ambito di quelli già noti in letteratura.

Dapprima vengono introdotti alcuni concetti generali di meccanica statistica, ed i punti chiave della teoria dei fenomeni critici, in particolar modo il concetto di fase di un sistema, e la suddivisione in classi di universalità per i sistemi che presentano transizione di fase. Viene anche lasciato spazio alla presentazione dei criteri che permettono di individuare la presenza di più fasi per un sistema, ed alle caratteristiche che determinano la classificazione di tali sistemi, con particolare riguardo agli esponenti critici.

Si passa quindi ad illustrare i concetti introdotti e le tecniche risolutive più diffuse, in particolar modo le tecniche legate alla teoria dei random walks, nel caso di alcuni modelli particolarmente semplici. Ciò al fine di prendere confidenza con il fenomeno della transizione di fase, analizzando in casi concreti le modalità con cui esso si presenta.

Si fa, inoltre, una breve presentazione generale del modello di Ising, prescelto in quanto ideale prototipo di una vasta ed interessante classe di fenomeni.

Quindi si presenta la Linked Cluster Expansion per accoppiamento a primi vicini, uno dei metodi di indagine perturbativi e degli strumenti computazionali più efficaci nel caso di sistemi ordinati tipo modello di Ising, le cui serie possiedono ottime proprietà di analiticità, con raggio di convergenza che spesso raggiunge il punto critico dall'alto in temperatura.

Si mostrano, in particolar modo, i risultati fondamentali, ed i procedimenti di "rinormalizzazione" della semplice espansione in serie che permettono di risommare analiticamente il contributo di gran parte dei termini, lasciando disatteso il solo compito di sommare su una classe relativamente ristretta di grafi.

Nel capitolo successivo si presenta il già citato metodo di Kac e Ward per reticoli planari periodici. L'esposizione si discosta da quella tradizionale, poiché abbiamo preferito focalizzare la nostra attenzione sulla individuazione di quegli strumenti che sono estendibili a situazioni più generali, e di quelli che invece fanno appello in maniera critica a caratteristiche metriche o topologiche del piano.

Questo è stato fatto in vista del nostro proposito di trovare una generalizzazione del metodo, per reticoli arbitrari e per il calcolo delle funzioni a q punti connesse.

Riteniamo infatti che il metodo di Kac e Ward da noi riproposto, a dispetto dell'apparente accidentalità di alcuni risultati (cancellazioni esatte che a prima vista potrebbero sembrare fortunose ed irripetibili), in realtà nasconde dei meccanismi profondi e generali, e presenta numerosi spunti di sviluppo che ci accompagneranno in tutto il seguito di questo lavoro.

Anche al fine di indagarne più a fondo i meccanismi, per quanto ci è possibile, analizzeremo quindi alcune derivazioni non banali di esso: la prima è dovuta a P. W. Kasteleyn, e riguarda la risoluzione esatta del problema delle tassellazioni compatte con dimeri; la seconda è originale, e concerne un problema di polimeri ramificati in dimensione generica, che, oltre all'interesse specifico in qualità di modello esattamente risolubile, riesce forse nell'intento di mostrare le potenzialità del metodo di Kac e Ward anche in $D > 2$, e di esplorare in maniera intuitiva il ruolo della topologia del sistema ai fini della sua risolubilità esatta.

Una volta approfondita la conoscenza del metodo e delle circostanze in cui ciascun passaggio del procedimento risulta applicabile, possiamo passare al tentativo di generalizzazione che ci siamo proposti.

La perdita di alcune proprietà caratteristiche dei reticoli planari, accompagnata dalla scomparsa di alcune garanzie legate all'esistenza di invarianti topologici del piano, ci costringerà ad introdurre dei nuovi formalismi al fine di ricostruire un meccanismo canonico per le cancellazioni che conducono all'espressione desiderata per l'energia libera.

Riusciremo a dimostrare l'esistenza di un tale meccanismo, e descriveremo un algoritmo ricorsivo per implementarlo. Questo, però, come prevedibile, in generale non ci permetterà di risommare lo sviluppo di Kac e Ward nella nostra riformulazione, che sarà quindi soltanto una serie perturbativa esatta, in un parametro, strettamente correlato al parametro di espansione standard, ma da esso distinto.

Alcune proprietà di universalità da noi dimostrate, riguardo ai coefficienti topologici che compaiono nelle nostre serie, ci permetteranno quindi di utilizzare uno stratagemma per calcolare tali coefficienti non per mezzo di un algoritmo ricorsivo, bensì in forma chiusa in termini di funzioni generatrici. La nostra serie, quindi, anziché essere una serie diagrammatica, diviene una serie ordinaria, in un unico indice intero, il cui generico termine è espresso come quadratura di una funzione nota in forma chiusa.

Le proprietà di unicità di cui parlavamo sopra ci permettono di riconoscere la nostra serie come quella ottenibile, in seguito ad un certo numero di manipolazioni, a partire dalla serie della Linked Cluster Expansion. Riconosciamo così nel nostro parametro di sviluppo un parametro che interpola fra le lagrangiane locali che originano rispettivamente il modello gaussiano, esattamente risolubile, ed il modello di Ising. Il nostro sviluppo è quindi una espansione nell'intorno del punto fisso gaussiano.

Questa nuova prospettiva sarà accompagnata da una interessante conseguenza. Scopriremo infatti che è possibile eseguire, per differenza nell'intorno del modello di Ising, lo stesso sviluppo all'altro estremo dell'intervallo di valori del parametro utili per l'interpolazione. Tale nuovo sviluppo, proprio poiché eseguito per differenza a partire da un risultato non noto, risulta particolarmente arduo. Ci viene però in soccorso l'equazione di Dobrushin-Lanford-Ruelle (DLR), in una sua versione leggermente generalizzata, che ci permette di diminuire drasticamente il numero di parametri liberi, da fissare sulla base del migliore raccordo con l'altro estremo dello sviluppo. L'intervento cruciale dell'equazione DLR, ed il fatto che i parametri indeterminati vadano fissati per mezzo del raccordo con un estremo lontano dello sviluppo, ci hanno portato ad appellare questo nuovo sviluppo *DLR balistica*.

Notiamo che la presenza di un duplice sviluppo, eseguito ai due estremi dell'intervallo su cui avviene l'interpolazione, abbassa le richieste sul raggio di convergenza delle serie corrispondenti, poichè è sufficiente che la somma dei due raggi di convergenza sia maggiore della lunghezza dell'intervallo, affinchè si possa sperare di avere un raccordo significativo per valori intermedi.

In chiusura di capitolo osserviamo come la riscrittura della nostra serie fornisce delle inaspettate informazioni su una certa classe di sistemi disordinati. In particolare, si trova non perturbativamente, all'interno dello spazio delle fasi per sistemi di spin con disordine quenched locale (operatore rilevante in $D = 3$, via criterio di Harris), un sottospazio in cui la coordinata relativa all'operatore del disordine è identicamente nulla.

In ultimo si discutono sinteticamente le prospettive di sviluppo ed i nuovi possibili spunti di ricerca originati da questo lavoro, inquadrandoli all'interno dell'attuale panorama della ricerca nella Fisica dei Fenomeni Critici.

Capitolo 1

Meccanica statistica e fenomeni critici.

Introduciamo alcuni concetti generali di meccanica statistica, in particolar modo il concetto di limite termodinamico per sistemi hamiltoniani, che sta alla base del fenomeno della *transizione di fase*. Passiamo quindi ad esporre brevemente i punti chiave della teoria dei fenomeni critici, in particolar modo il concetto di *fase* di un sistema, e la suddivisione in *classi di universalità* per i sistemi che presentano transizione di fase. Infine, viene lasciato spazio alla presentazione dei criteri che ci permettono di individuare la presenza di più fasi per un sistema, ed alle caratteristiche che ci permettono di classificare tali sistemi, con particolare riguardo agli *esponenti critici*.

Seguiamo in questo principalmente l'esposizione che si trova nei capitoli introduttivi dei volumi di G. Parisi [1] e R. J. Baxter [4], ed a tratti l'analisi svolta in [8].

1.1 Meccanica statistica classica all'equilibrio.

Lo scopo principale della meccanica statistica è quello di derivare le proprietà di corpi macroscopici a partire da una descrizione della dinamica dei costituenti microscopici (ad esempio molecole di un gas, spin elettronici di un magnete, etc.). A tal fine il normale approccio della meccanica hamiltoniana o lagrangiana risulta proibitivo, a causa dell'elevato numero di gradi di libertà che descrivono il sistema, e diviene necessario ricorrere a metodi probabilistici.

È importante, quindi, individuare per le configurazioni del sistema, non le traiettorie nell'evoluzione temporale, bensì la loro distribuzione di probabilità all'equilibrio termodinamico, e quindi calcolare i valori di aspettazione per le quantità macroscopiche del sistema, ovvero le loro medie su tale distribuzione di probabilità.

Nella gran parte dei sistemi statistici[1] tale distribuzione di probabilità all'equilibrio è data dalla formula di Boltzmann (abbiamo posto $\beta = (k_B T)^{-1}$):

$$p_{\mathrm{eq}}(q,p) = \frac{e^{-\beta H(q,p)}}{Z_\beta}; \tag{1.1}$$

$$Z_\beta = \int dq\, dp\; e^{-\beta H(q,p)}; \tag{1.2}$$

dove il fattore di normalizzazione Z, dipendente dalla temperatura, è noto col nome di *funzione di partizione* del sistema, ed il fattore esponenziale $e^{-\beta H(q,p)}$ con cui pesiamo ciascuna configurazione è noto come *fattore di Gibbs*.

Avremo così che, per un sistema all'equilibrio ad una data temperatura, il valor medio di una qualunque quantità fisica sarà dato da

$$\langle A \rangle = \int dq\, dp\; A(q,p)\, p_{\mathrm{eq}}(q,p) \tag{1.3}$$

Questo modo di impostare il problema si può estendere a sistemi in cui lo spazio delle configurazioni ammesse non sia necessariamente l'ordinario spazio delle fasi della meccanica classica. Più in generale chiameremo σ una configurazione del nostro sistema, in uno spazio di configurazioni discreto o continuo, e generalizzeremo le nostre formule, ad esempio, nel caso di spazio delle configurazioni discreto:

$$p_{\mathrm{eq}}[\sigma] = \frac{e^{-\beta H[\sigma]}}{Z_\beta}; \tag{1.4}$$

$$Z_\beta = \sum_\sigma e^{-\beta H[\sigma]}; \tag{1.5}$$

Introduciamo delle quantità termodinamiche che avranno grande interesse nel seguito. Avremo per l'energia libera del sistema:

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \tag{1.6}$$

e similmente per l'energia interna

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \frac{F}{T} \tag{1.7}$$

o le loro densità, $F/V = f$ e $U/V = u$. Il calore specifico è definito da

$$c = \frac{\partial}{\partial T} u \tag{1.8}$$

[1]Ovvero, per i cosiddetti *sistemi hamiltoniani*.

1.2 Il meccanismo della transizione di fase.

La presenza di un numero macroscopico di gradi di libertà nel sistema è alla base di un fenomeno che non ha analogo nella meccanica classica o quantistica ad un numero finito di gradi di libertà: sistemi governati dalla medesima hamiltoniana possono trovarsi in fasi diverse, oppure subire delle repentine transizioni da una fase ad un'altra al variare della temperatura esterna. Tale fenomeno è noto col nome di *transizione di fase*. Nel seguito illustreremo tale meccanismo con degli esempi.

L'acqua contenuta in un bicchiere è costituita da un gran numero di molecole, di cui noi non conosciamo le singole coordinate hamiltoniane. Possiamo però assumere di conoscere l'hamiltoniana che governa il sistema, almeno approssimativamente, e di conoscere le sue simmetrie (ad esempio sotto scambio di due molecole). Tale hamiltoniana sarà verosimilmente costituita da un termine cinetico per ogni molecola, ed un debole potenziale attrattivo a corto raggio fra le molecole. Nulla di particolarmente strano, o singolare. Eppure, sulla base di essa, noi dovremmo essere in grado di prevedere che la densità, come funzione della temperatura, subisce una variazione di tre ordini di grandezza per un intervallo di temperatura molto ristretto a cavallo dei 100°C, e che l'aspetto macroscopico che essa assume al di sotto e al di sopra di tale temperatura è talmente diverso da indurci a parlare di due fasi distinte per lo stesso sistema: acqua in fase liquida e di vapore. Inoltre tali due fasi *coesistono* almeno per una certa temperatura, poiché, anche sperimentalmente, vediamo coesistere liquido e vapore in un preciso intervallo del processo di riscaldamento, in cui la temperatura rimane ferma al valore *critico* (i nostri 100°C) e l'energia somministrata è utilizzata come calore latente per cambiare il rapporto quantitativo fra le due fasi.

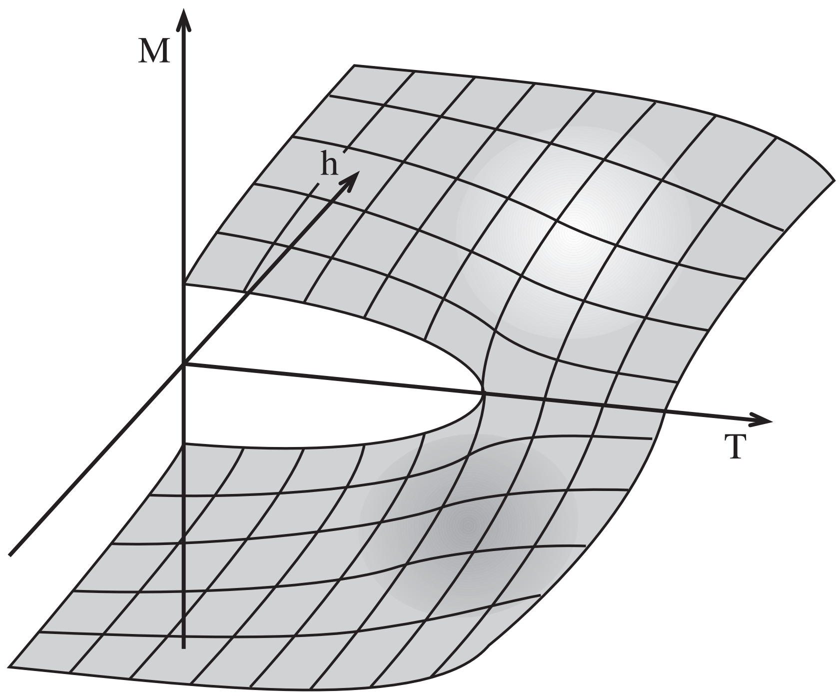
Similmente una barra metallica, ad esempio di ferro, in un forte campo magnetico esterno sarà quasi totalmente magnetizzata (quasi totalmente rispetto al valore di saturazione M_∞, limite per intensità del campo che tende ad infinito). Sorprendentemente, per valori del campo che tendono a zero, la magnetizzazione, anziché diminuire fino a zero, tende ad un valore finito residuo M_0. Vista la simmetria del problema, è evidente che per campi orientati in direzione opposta la magnetizzazione avrà lo stesso andamento, in direzione opposta. Di nuovo, come la densità nel caso dell'acqua, la magnetizzazione ha una discontinuità intorno allo zero del campo esterno, e, per campo esterno nullo, è possibile avere simultaneamente regioni diverse del campione nei due diversi stati di magnetizzazione. Se inoltre studiamo l'andamento della variazione della magnetizzazione attraverso questa discontinuità con la temperatura, scopriamo che essa diminuisce progressivamente man mano che la temperatura aumenta, fino ad annullarsi (con una discontinuità della derivata prima) alla cosiddetta *temperatura di Curie* del materiale (vedi figura 1.1).

Entrambi questi fenomeni, la non analiticità delle quantità termodinamiche (la densità vs. la temperatura per l'acqua, o la magnetizzazione vs. il campo magnetico esterno per il campione metallico, ad esempio, presentano una discontinuità), e la coesistenza di più fasi per il sistema, sono particolarmente sorprendenti. Esse possono essere comprese se si ammette che il sistema abbia più di una situazione di equilibrio locale (un minimo dell'energia libera), e che, nel limite di volume infinito, possa passare da un minimo ad un altro soltanto a patto di subire dei mutamenti globali e repentini. Nella sezione seguente cercheremo di inquadrare in maniera più sistematica questi argomenti a questo stadio ancora un po' vaghi.

1.3 Presenza di più fasi per il sistema.

Gli operatori "fisici" di un sistema, ovvero quegli operatori che possono corrispondere a misure effettuabili sul sistema, hanno la caratteristica di essere localizzati nello spazio, poiché ciascuna misura può essere effettuata soltanto su volumi limitati. Per sistemi infinitamente estesi potremmo avere degli stati del sistema che possono essere portati uno nell'altro soltanto attraverso l'applicazione di un operatore non localizzato. In particolar modo potremo

Figura 1.1: *Andamento della magnetizzazione di una sbarra metallica ideale in funzione del campo esterno e della temperatura.*



avere che gli stati di minimo per l'energia libera siano l'orbita di una certa simmetria che può essere implementata sul sistema solo per mezzo di una operazione non localizzata. Diremo che due stati con questa caratteristica appartengono a *fasi distinte* del sistema (o, con una terminologia più incisiva, a *mondi fisici disgiunti*).

Pensiamo, ad esempio alla nostra sbarra magnetizzata, ed in particolar modo a due possibili stati di magnetizzazione, verso l'alto o verso il basso. L'operatore che porta uno stato nell'altro, a volume finito, è l'operatore che rovescia tutti gli spin degli elettroni. Esso però, nel limite di volume infinito, non è un operatore locale. Non di meno il rovesciare tutti gli spin è una simmetria per il nostro spazio degli osservabili locali, che preserva la struttura di tale spazio (somma, prodotto e *-involuzione).

La non località dell'operatore corrispondente è alla base del fatto che questa simmetria non può essere tradotta in una simmetria di Wigner sullo spazio di Hilbert degli stati appartenenti alla stessa fase. Quando ciò avviene si dice che la simmetria è *rotta*.

Più figurativamente, se consideriamo tutti gli spazi di Hilbert disgiunti corrispondenti a tutti i mondi fisici disgiunti per il sistema, tale simmetria non è una simmetria di Wigner su questi spazi perché li scambia uno con l'altro.

Ad esempio, la fase a cui appartiene lo stato con gli spin tutti rivolti verso l'alto è quella che contiene gli stati con tutti gli spin verso l'alto, a meno di un numero finito (conseguenza della località degli operatori fisici). La simmetria che rovescia tutti gli spin porta questa fase nella fase corrispondente a spin tutti rivolti verso il basso a meno di un numero finito. La rottura della simmetria è dovuta all'impossibilità di comparare le proprietà di due stati, quello originario ed il trasformato, poiché essi appartengono a due spazi di Hilbert (come dire, a due mondi fisici) disgiunti.

1.4 Criterio delle fasi di Ruelle.

Esistono diversi criteri per stabilire se un sistema termodinamico ad una data temperatura ammette o meno più di una fase. Uno dei più potenti, ed anche dei più rigorosi, è stato esposto da D. Ruelle nel suo libro sui fondamenti della meccanica statistica [6]. Una esposizione più concisa si trova in [8].

L'idea è che, per i sistemi a volume finito, è possibile studiare la dipendenza delle funzioni di correlazione dei campi dalle condizioni assegnate al bordo, con particolare riguardo a cosa accade nel limite termodinamico. Nel seguito chiameremo ∂V l'insieme delle variabili di bordo, e $\overline{\varphi}$ una scelta particolare per esse.

Il risultato rimarchevole di Ruelle è che, al variare delle condizioni al bordo asintotiche, qualora esista il limite di volume infinito, vengono selezionati tutti gli stati possibili per il sistema. Da questo segue che, se tutte le funzioni di correlazione sono convergenti e convergono a limiti indipendenti dalle condizioni al bordo, allora il sistema ha una sola fase, e non avviene rottura spontanea di simmetria. Al contrario, l'esistenza anche per una sola funzione di correlazione di due limiti distinti per $V \to +\infty$ per due scelte diverse di variabili al bordo è indice della presenza di più fasi, e tale operatore è un buon parametro d'ordine per il sistema. Inoltre, se le diverse condizioni al bordo che individuano fasi differenti sono legate da una operazione di simmetria, questa simmetria è quella che viene rotta.

Infatti, se g è una simmetria interna (cioè che lascia invariata l'hamiltoniana, e quindi anche la misura associata ad ogni configurazione), scegliendo una particolare condizione al bordo $\overline{\varphi}$, si ha

$$\langle g\varphi_1 \cdots g\varphi_n \rangle_{\overline{\varphi}} = Z_{\overline{\varphi}}^{-1} \sum_{\varphi} g\varphi_1 \cdots g\varphi_n \, e^{-\beta(H(\varphi)+H_{\partial V}(\varphi,\overline{\varphi}))}$$

che, in virtù dell'invarianza dell'hamiltoniana sotto l'operazione di simmetria g, in seguito ad un cambio di variabile diviene

$$\begin{aligned} &= Z_{\overline{\varphi}}^{-1} \sum_{\varphi} \varphi_1 \cdots \varphi_n \, e^{-\beta(H(\varphi)+H_{\partial V}(\varphi,g^{-1}\overline{\varphi}))} \\ &= \langle \varphi_1 \cdots \varphi_n \rangle_{g^{-1}\overline{\varphi}} \end{aligned} \tag{1.9}$$

Si trova così che la non invarianza delle funzioni di correlazione nel limite termodinamico è equivalente alla dipendenza dalle condizioni al bordo non simmetriche.

Quando le condizioni al bordo sono simmetriche (come nel caso, ad esempio, di condizioni al bordo periodiche) le funzioni di correlazione sono invarianti. Non è possibile stabilire se vi è o meno rottura di simmetria dallo studio di queste sole condizioni al bordo, poiché esse possono individuare sia l'unica fase per il sistema che, in presenza di più fasi, la fase mista simmetrica.

1.5 Cluster property e fasi pure.

Un altro criterio molto efficace per l'individuazione della presenza di più fasi è la verifica della *cluster property.* A differenza del criterio di Ruelle, che richiede di studiare le funzioni di correlazione al variare di tutte le possibili condizioni al bordo, questo criterio è operativamente più semplice, poiché, studiando le funzioni di correlazione sulla sola fase simmetrica, permette di capire quando tale fase è una fase pura o meno. Infatti, sotto opportune ipotesi di regolarità per il sistema fisico in questione, vale che, se e solo se il sistema presenta una sola fase, tutte le coppie di quantità fisiche A e B

localizzate, nel limite in cui esse vengano calcolate su regioni del sistema infinitamente distanti, divengono scorrelate, ovvero, definendo $U(\mathbf{r})$ come l'operatore di traslazione di vettore $\mathbf{r}$,

$$\lim_{|\mathbf{r}|\to+\infty} \left(\left\langle U(\mathbf{r}) A U^{+}(\mathbf{r}) \cdot B \right\rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \right) = 0 \tag{1.10}$$

Il significato fisico di tale proprietà è che lo stato di equilibrio per ciascuna fase subisce modifiche soltanto locali per applicazione di operatori locali (ad esempio operatori che rovesciano gli spin soltanto su un volume limitato), e quindi non può presentare correlazioni non banali fra osservabili troppo distanti.

La cluster property ci dice che, nel caso particolare di sistemi di spin, essendo il valore di aspettazione per un solo spin $\langle \sigma_x \rangle$ nullo per simmetria nella fase pura, una funzione di correlazione $\langle \sigma_x \sigma_{x+r} \rangle$ che non si annulli per distanze infinite è indice della separazione delle due fasi di magnetizzazione verso l'alto e verso il basso. Il suo annullarsi, a rigore, non darebbe la certezza della presenza di una sola fase, poiché bisognerebbe controllare che si annullano anche le altre funzioni di correlazione. Spesso, comunque, è un ottimo indizio in tal senso. Inoltre, in alcuni casi particolarmente semplici (ad esempio Ising in una dimensione) si ha il controllo totale di tutte le funzioni di correlazione.

1.6 Introduzione degli esponenti critici.

L'analisi di specifici modelli nello studio delle transizioni di fase spesso stabilisce dei sorprendenti punti di contatto fra campi della fisica molto diversi, non solo sistemi meccanici di basse energie (transizioni solido-liquido-vapore, ordine-disordine nelle leghe ed in soluzioni polimeriche, magnetizzazione spontanea in materiali ferromagnetici etc.), ma anche in campi apparentemente distanti, quali la fisica delle particelle elementari, o la biologia, o l'economia. Ciò nonostante è consuetudine utilizzare una terminologia standard, mutuata dai sistemi ferromagnetici. Questo è dovuto al fatto che tali sistemi offrono un ampio spettro di problemi, che, a meno di traslitterazioni di termini, copre pressocché tutte le problematiche di interesse per sistemi hamiltoniani.

È questa la ragione per cui solitamente chiameremo σ_i le variabili di campo, e σ una loro configurazione, ed inoltre indicheremo con h il campo esterno, ed m il valor medio delle σ_i che, come la magnetizzazione media, si accoppia ad esso.

Per sistemi che presentano transizione di fase, è inoltre consuetudine utilizzare, anziché la temperatura T, il parametro adimensionato

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \tag{1.11}$$

Per sistemi magnetici si è soliti introdurre la *suscettività magnetica* χ, come la variazione della magnetizzazione rispetto al campo esterno:

$$\chi(h,t) = \frac{\partial}{\partial h} m(h,t) \tag{1.12}$$

Ricordiamo una utile identità di meccanica statistica elementare. Per hamiltoniane in cui le variabili siano accoppiate ad un campo esterno ($H_{\text{ext. f.}} = -h \cdot \sum \sigma_i$) si ha:

$$\begin{aligned} \chi_{h=0} &= \left.\frac{\partial m}{\partial h}\right|_{h=0} = \frac{\partial}{\partial h}\left(\frac{1}{N}\sum_i \langle \sigma_i \rangle\right)\Bigg|_{h=0} = \\ &= \frac{\beta}{N}\sum_{i,j}\left[\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle\right]\Bigg|_{h=0} \end{aligned}$$

Con la nostra scelta di definizioni ed unità il punto critico del sistema si trova adesso ad avere coordinate $P_c = (h = 0, t = 0)$. Spesso le discontinuità o le non analiticità delle quantità di interesse fisico nell'intorno del punto critico hanno un andamento la cui parte preponderante è data da una legge di potenza, con esponente eventualmente non intero. Tali esponenti sono noti col nome di *esponenti critici*, ed hanno un ruolo fondamentale nella classificazione dei diversi sistemi che presentano transizione di fase.

In particolare ci si aspetta che:

$$m(h=0,t) \sim (-t)^{\beta} \qquad \text{per } t \to 0^- \tag{1.13a}$$

$$m(h,t=0) \sim h^{\frac{1}{\delta}} \qquad \text{per } h \to 0 \tag{1.13b}$$

$$\chi(h=0,t) \sim t^{-\gamma} \qquad \text{per } t \to 0^+ \tag{1.13c}$$

$$\chi(h=0,t) \sim (-t)^{-\gamma'} \qquad \text{per } t \to 0^- \tag{1.13d}$$

$$c(h=0,t) \sim t^{-\alpha} \qquad \text{per } t \to 0^+ \tag{1.13e}$$

$$c(h=0,t) \sim (-t)^{-\alpha'} \qquad \text{per } t \to 0^- \tag{1.13f}$$

Per sistemi termodinamici le fluttuazioni locali solitamente influenzano al più un piccolo intorno del sistema. Una delle maggiori peculiarità dei sistemi che presentano transizione di fase è che le fluttuazioni locali hanno un raggio di influenza sul sistema che diverge nell'intorno del punto critico. Tale raggio di influenza è detto *lunghezza di correlazione* del sistema. Andremo a definire rigorosamente tale quantità nelle prossime righe, ma è forse istruttivo introdurre il fenomeno attraverso l'esempio della sbarra metallica.

A temperature molto alte e campo esterno nullo i momenti magnetici degli elettroni (che chiameremo spin nel seguito) sono orientati in maniera casuale. Abbassando la temperatura cominciano a manifestarsi delle correlazioni fra gli spin più vicini per effetto delle loro interazioni, che tendono ad allinearli: nel computo della funzione di partizione "pesano" un po' di più le configurazioni in cui gli spin vicini sono di segno concorde. Diminuendo ancora la temperatura pesano sempre di più le configurazioni in cui il sistema è quasi tutto magnetizzato: si formeranno dei grandi domini con spin quasi tutti verso l'alto o quasi tutti verso il basso. A ridosso della temperatura critica tali domini diverranno tanto grandi da occupare tutto il campione, che sarà così tutto nella stessa fase. Abbassando ancora la temperatura il numero di spin non allineati alla magnetizzazione macroscopica del dominio continuerà a diminuire, fino ad annullarsi nel limite di temperatura nulla.

Da quanto detto è chiaro che, almeno alle alte temperature, il sistema, oltre alla distanza tipica dei costituenti elementari, presenta una ulteriore lunghezza tipica, che indica appunto fino a quale distanza giungono gli effetti cooperativi causati dall'interazione, prima che siano sopraffatti dal disordine. Si potrebbe quindi introdurre, per $t > 0$, una funzione del tipo

$$G(x, x') = \langle \sigma_x \sigma_{x'} \rangle \qquad t > 0 \tag{1.14}$$

che, fissato x, al variare di x', fa qualcosa di simile a "contare" quanti spin sono influenzati dall'averne fissato uno. La somma su x' della quantità appena introdotta, quindi, sembra divergere nell'intorno superiore del punto critico.

A temperature inferiori a quella critica, però, il raggio di influenza delle fluttuazioni torna ad accorciarsi. Infatti l'aver fissato uno spin in direzione concorde alla magnetizzazione non induce un grande effetto sugli altri spin che sarebbero comunque stati magnetizzati in quella direzione, ed il fissarlo in direzione discorde induce al più la creazione di un dominio discorde a cortissimo raggio. La buona definizione di una funzione che valuti gli effetti cooperativi fra le variabili del sistema, valida a tutte le temperature, è

$$G(x, x') = \langle \sigma_x \sigma_{x'} \rangle - \langle \sigma_x \rangle \langle \sigma_{x'} \rangle \tag{1.15}$$

Essa è nota col nome di *funzione di correlazione connessa.*

Per numerosi sistemi, ed in particolar modo i sistemi di spin, tale funzione ha un andamento approssimato a grande distanza del tipo

$$G(|x - x'| = r) \sim r^{-D+2-\eta} e^{-r/\xi} \tag{1.16}$$

dove D è la dimensionalità del sistema, η è un nuovo esponente critico, chiamato *dimensione anomala* del campo σ [2],ξ è la lunghezza di correlazione, anch'essa con andamento interessante intorno al punto critico, dato da

$$\xi(h = 0, t) \sim t^{-\nu} \qquad \text{per } t \to 0^+ \tag{1.17a}$$

$$\xi(h = 0, t) \sim (-t)^{-\nu'} \qquad \text{per } t \to 0^- \tag{1.17b}$$

[2] Esso descrive l'andamento della funzione di correlazione al punto critico.

1.7 L'ipotesi di scala.

Lo studio degli andamenti delle quantità fisiche nell'intorno del punto critico porta ad assumere, almeno in tale intorno, una dipendenza semplificata dai due parametri termodinamici in gioco t e h. Alcune di queste funzioni in due variabili sono ben approssimate da funzioni omogenee dei loro argomenti. È stato ipotizzato che tale dipendenza semplificata in realtà possa essere estesa ad un intorno molto più ampio del dominio dei parametri.

Un esempio di tali relazioni è la seguente

$$\frac{h}{kT} = m|m|^{\delta-1} f_s(t|m|^{-\frac{1}{\beta}}) \tag{1.18}$$

dove $f_s(x)$ si annulla per una certa ascissa negativa $-x_0$, ed ha intercetta non nulla. Studiamo tale espressione per dei particolari valori delle tre variabili in gioco. Questa analisi dapprima giustificherà la forma della relazione introdotta, quindi ne mostrerà l'utilità. Troviamo che

sul taglio: si ha $h = 0$, $t < 0$ ed $m = \pm m(h = 0, t)$, da cui segue

$$t = -x_0 |m|^{\frac{1}{\beta}};$$

espressione conforme alla (1.13a);

per $t = 0$: essendo l'intercetta non nulla si deve avere

$$h \sim m^{\delta};$$

espressione conforme alla (1.13b);

differenziando rispetto ad m: si trova, dalla definizione di suscettività magnetica,

$$\frac{1}{kT \cdot \chi} = |m|^{\delta-1}(\delta f_s(x) - \beta^{-1} x f_s'(x)); \qquad x = t|m|^{\frac{-1}{\beta}};$$

che, specializzata nuovamente ai valori assunti sul taglio, ci porta a

$$\chi \sim |m|^{-\delta+1};$$

per $t > 0$ ed $m \to 0$: siamo nella regione "paramagnetica" per cui, almeno per piccoli valori del campo esterno, h ed m saranno proporzionali. La nostra relazione ci fa trovare la dipendenza dalla temperatura della costante di proporzionalità, ovvero

$$\frac{1}{\chi} \simeq \frac{h}{m} \sim t^{\beta(\delta-1)};$$

le ultime due inattese espressioni ci portano alla prima delle cosiddette *relazioni di scala*, ovvero

$$\gamma = \gamma' = \beta(\delta - 1) \tag{1.19a}$$

Con simili ragionamenti si trovano anche le altre relazioni di scala

$$\alpha + 2\beta + \gamma' = 2; \tag{1.19b}$$

$$\nu = \nu' = \frac{\gamma}{2 - \eta} \tag{1.19c}$$

e la relazione di *iperscala*

$$D\nu = 2 - \alpha \tag{1.19d}$$

che coinvolge ipotesi un po' più forti, soddisfatte probabilmente soltanto per dimensionalità comprese fra una certa dimensione critica inferiore e superiore, dipendenti dal sistema in questione, $D_< \leq D \leq D_>$. Per modelli di spin tali dimensioni critiche sono $D_< = 1$; $D_> = 4$.

Noi non diamo qui giustificazione delle assunzioni per gli andamenti delle varie quantità, che portano alle relazioni di scala, né illustriamo ulteriori procedimenti attraverso cui ciò avviene. Rimandiamo il lettore a tal fine alla vasta letteratura in proposito, ed in particolare all'articolo di Kadanoff *et al.* [17].

1.8 Universalità.

Il comportamento di un sistema ad infiniti gradi di libertà, ed in particolare il suo comportamento critico, saranno determinati inevitabilmente dall'espressione dell'hamiltoniana del sistema.

Una delle caratteristiche più interessanti nello studio delle transizioni di fase è che le caratteristiche essenziali del comportamento critico (quali esponenti critici, andamenti asintotici delle funzioni di correlazione, rapporti fra gli andamenti negli intorni destro e sinistro della temperatura critica etc.) dipendono fortemente dalle proprietà di simmetria dell'hamiltoniana, ma non dai dettagli dell'interazione.

Più precisamente, è stato ipotizzato da Fisher [22] e Griffiths [24] che, per una classe ad un parametro di hamiltoniane

$$H_\lambda[\sigma] = H_0[\sigma] + \lambda H_1[\sigma] \tag{1.20}$$

di cui soltanto la parte H_0 gode di invarianza per una data operazione di simmetria g

$$[H_0, g] = 0; \qquad [H_1, g] \neq 0; \tag{1.21}$$

gli esponenti critici del sistema governato dall'hamiltoniana H_λ saranno costanti per tutto l'intervallo $\lambda \neq 0$, ed eventualmente avranno una discontinuità in $\lambda = 0$ (questa, in realtà, è la regola, più che l'eccezione).

La veridicità di questa ipotesi, tra l'altro, farebbe comprendere la ragione per cui sistemi fisici tanto diversi, che hanno in comune soltanto la dimensionalità spaziale e la dimensionalità del parametro d'ordine, possono avere comportamenti critici identici.

In questo ambito, la modellizzazione di un sistema fisico assume un ruolo del tutto originale: essa non è più una approssimazione, spesso rude, della realtà, bensì corrisponde alla scelta di studiare un modello della stessa *classe di universalità*, governato cioè da una hamiltoniana con le stesse simmetrie e lo stesso *range* di interazione, con la garanzia che i risultati di interesse fisico ottenuti (ovvero gli esponenti critici, ad esempio, e non gli andamenti particolari lontano dalla regione critica) saranno *esattamente* uguali a quelli del sistema fisico di interesse.

Concludiamo la sezione con una piccola nota di carattere pratico: può capitare talvolta che la simmetria che la classe ad un parametro di sistemi assume per un certo valore non sia evidente dalla nostra formulazione del problema. Questo rende particolarmente complesso, ed in generale non risolto, il problema di comprendere quando due modelli di cui non si conoscano le soluzioni esatte appartengono alla stessa classe di universalità.

Capitolo 2

Soluzione esatta di modelli semplici.

In questo capitolo mostreremo la soluzione esplicita nel caso di alcuni modelli particolarmente semplici. Prenderemo così confidenza con il fenomeno della transizione di fase, analizzando in casi concreti le modalità con cui esso si presenta.

Questo capitolo, inoltre, introdurrà il modello principe di tutto il presente lavoro di tesi, il modello di Ising. Più che un sacrificio di generalità, questa scelta vuole essere un guadagno in concretezza, in quanto tale modello risulta essere l'ideale prototipo di una vasta ed interessante classe di fenomeni.

In ultimo, saranno introdotte, ed illustrate in concreto su casi elementari, le principali tecniche di risoluzione *standard* da noi ampiamente sfruttate nel corpo della tesi, in modo particolare il formalismo dei *random walks*.

2.1 Il modello di Ising.

Negli ultimi cinquanta anni i modelli matematici hanno avuto un ruolo chiave nello sviluppo della fisica delle basse energie. Questo è avvenuto in particolar modo nell'ambito dei fenomeni critici, in cui l'ipotesi di universalità ha stabilito un punto di contatto fra le modellizzazioni fisico-matematiche ed i dati sperimentali.

La scelta di un modello che riassuma le peculiarità di un sistema fisico di interesse passa attraverso l'individuazione, fra tutti i gradi di libertà del sistema, di quelle variabili che giocano un ruolo rilevante per il fenomeno in questione (ad esempio, le sole variabili di spin, e non le variabili canoniche di elettroni e nuclei, per un sistema di cui si voglia studiare la transizione da ferromagnete a paramagnete). Altro passo essenziale è quello di rimpiazzare l'hamiltoniana del sistema reale, che presenta una dipendenza più o meno nota da un certo numero di parametri, anch'essi conosciuti soltanto approssimativamente, con una hamiltoniana semplificata, che sia però sufficientemente flessibile da riprodurre, al variare dei suoi parametri, tutte le situazioni fisiche in cui si può trovare il campione. Per quanto visto sulle classi di universalità, è essenziale che tale hamiltoniana approssimata goda delle stesse simmetrie di quella reale.

Ad esempio, una buona approssimazione per studiare la situazione all'equilibrio per un magnete reale è assumere che gli spin siano associati a particelle essenzialmente localizzate sui siti di un reticolo regolare, e che la forza che tende ad orientare gli spin, (ovvero l'interazione di scambio, che nella realtà fisica è a corto raggio, avendo una decrescenza esponenziale), agisca soltanto fra primi vicini. Scelta una direzione per la quantizzazione degli spin, una buona base per le configurazioni è data da tutte le assegnazioni di spin $\sigma_i = \pm 1$ per le variabili associate a ciascun sito reticolare.

Il modello che studia la magnetizzazione attraverso le approssimazioni viste sopra, nel caso di un reticolo ipercubico di dimensione D, è noto in letteratura come modello di Ising in D dimensioni, ed ha hamiltoniana

$$H_I[\sigma] = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i; \tag{2.1}$$

dove sommare su $\langle ij \rangle$ significa sommare su tutte le coppie non ordinate di siti primi vicini.

Per tale modello le funzioni di correlazione di interesse sono i valori medi del prodotto di un numero finito q di variabili di spin, note come funzioni a q punti

$$G_q(x_1, \dots x_q) = \langle \sigma_{x_1}, \dots \sigma_{x_q} \rangle_{(h=0)}^{\text{connesse}} = -\beta \left. \frac{\partial^q F(J, h_{x_i})}{\partial h_{x_1} \dots \partial h_{x_q}} \right|_{h=0}; \tag{2.2}$$

ed in particolare il caso $q = 0$, energia libera del sistema, e $q = 2$, funzione di correlazione a due punti, che nella fase simmetrica è la prima indicatrice della eventuale presenza di più fasi.

Questo modello è esattamente risolubile a campo esterno generico in $D = 1$, ed esattamente risolubile a campo esterno nullo in $D = 2$ (la soluzione è dovuta a L. Onsager [18]). Non è nota la soluzione esatta per dimensioni superiori, però il problema perde di interesse per $D \geq 4$, poiché questa è la dimensione critica superiore del modello per cui le fluttuazioni hanno un ruolo determinante, ed al di là di essa il modello appartiene alla stessa classe di universalità del modello gaussiano (o modello libero), esattamente risolubile (come vedremo a breve), e quindi è possibile conoscere gli esponenti critici esatti per il sistema. Il problema aperto più interessante, quindi, anche alla luce delle evidenti applicazioni concrete, è il modello di Ising in $D = 3$.

2.2 Lo sviluppo di alte temperature.

Nel caso di sistemi di spin su reticolo generico Λ, l'espressione per la funzione di partizione si presta ad un certo numero di vantaggiose manipolazioni algebriche:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_\sigma e^{-\beta H[\sigma]} = \sum_\sigma e^{\beta J \sum_{\langle ij\rangle} \sigma_i \sigma_j} \\ &= \sum_\sigma \prod_{\langle ij\rangle} e^{\beta J \sigma_i \sigma_j} = \sum_\sigma \prod_{\langle ij\rangle} (\cosh\beta J + \sigma_i\sigma_j \sinh\beta J) \end{aligned} \tag{2.3}$$

otteniamo così un polinomio, $\prod_{\langle ij\rangle}(\cosh\beta J + \sigma_i\sigma_j \sinh\beta J)$, da sommare su tutti i valori che possono essere assunti dalle variabili σ_i. Possiamo pensare di associare a ciascuno dei monomi un sottografo del reticolo, secondo il seguente procedimento: ogni monomio conterrà il prodotto di termini del tipo $(\cosh\beta J)$ o del tipo $(\sigma_i\sigma_j \sinh\beta J)$, uno per ogni bond $\langle ij\rangle$ del reticolo; al monomio assoceremo il sottografo del reticolo dove sono stati cancellati tutti i bond per cui compare il fattore $(\cosh\beta J)$ (a tali bond assegneremo $n_{ij} = 0$), e sono rimasti solo quelli per cui compare il fattore $(\sigma_i\sigma_j \sinh\beta J)$ (a tali bond assegneremo $n_{ij} = 1$).

Una volta sommato sulle configurazioni σ, contribuiscono alla funzione di partizione soltanto i monomi di grado pari in ogni variabile. Ad essi sono associati quei sottografi per cui su ogni sito giunge un numero pari di bond "superstiti". Chiameremo tali sottografi $\mathcal{G}_{\text{even}}$.

$$Z = \Big(2^N \prod_{\langle ij\rangle} \cosh\beta J\Big) \cdot \sum_{\mathcal{G}_{\text{even}}} \prod_{\langle ij\rangle} (\tanh\beta J)^{n_{ij}} \tag{2.4}$$

Nel limite di $N \to +\infty$ il primo fattore è sempre regolare per ogni valore di $\tau = \tanh\beta J$. Il secondo fattore potrebbe invece celare al suo interno un comportamento critico, ovvero un punto di non analiticità per un valore di τ strettamente contenuto nel dominio $(0, 1)$. Scriveremo quindi:

$$Z = Z_{\text{reg.}} \cdot \sum_{\mathcal{G}_{\text{even}}} \prod_{\langle ij\rangle} \tau^{n_{ij}} \tag{2.5}$$

Questa espressione è esatta. Essa può essere risommata in casi eccezionali, ed in generale fornisce uno sviluppo per τ piccoli, noto come *sviluppo di alte temperature*[1].

$$Z = Z_{\text{reg.}} \cdot \sum_L C(L) \tau^L; \tag{2.6}$$

$$C(L) = \#\{\mathcal{G}_{\text{even}} / |\mathcal{G}_{\text{even}}| = L\}; \tag{2.7}$$

[1] Qui e nel seguito, per un grafo $\mathcal{G}$, con la notazione $|\mathcal{G}|$ intendiamo il numero di bond del grafo.

Il procedimento appena esposto per sviluppare la funzione di partizione si estende facilmente al calcolo delle funzioni a q punti. Ricordiamo che

$$Z \cdot \langle \sigma_{a_1} \cdots \sigma_{a_q} \rangle = \sum_{\sigma} \sigma_{a_1} \cdots \sigma_{a_q}\, e^{-\beta H[\sigma]} \tag{2.8}$$

Ripetendo le manipolazioni algebriche eseguite sopra, scopriamo che dopo la somma sulle configurazioni rimangono soltanto i monomi di grado pari in ogni variabile. Essi però corrispondono a sottografi del reticolo di coordinazione pari su tutti i siti, eccezion fatta per i siti $a_1, \cdots, a_q$, su cui deve essere dispari. Avremo quindi

$$Z \cdot \langle \sigma_{a_1} \cdots \sigma_{a_q} \rangle = \Big(2^N \prod_{\langle ij \rangle} \cosh \beta J \Big) \cdot \sum_{\substack{\mathcal{G}_{(i \neq a_i)\text{even}} \\ a_i \text{odd}}} \prod_{\langle ij \rangle} \tau^{n_{ij}} \tag{2.9}$$

Le debite relazioni di inclusione-esclusione portano quindi alle espressioni per le funzioni di correlazione fra q spin connesse, ovvero le funzioni a q punti.

2.3 Soluzione per Ising unidimensionale.

Specializziamo le formule appena trovate ad un esempio particolarmente semplice: il modello di Ising unidimensionale. Tale modello appartiene alla classe dei sistemi di spin su reticolo, introdotta alla sezione precedente, e corrisponde al caso in cui il reticolo è una catena unidimensionale infinita.

Trattiamo dapprima il sistema a volume finito, in cui il reticolo è una catena di N siti chiusa ad anello (condizioni periodiche al contorno portano alla fase simmetrica, come affermato dal criterio di Ruelle). Si trovano facilmente le

$$Z = Z_{\text{reg}} \cdot (1 + \tau^N); \tag{2.10}$$

$$Z \cdot \langle \sigma_a \sigma_b \rangle = Z_{\text{reg}} \cdot (\tau^{|a-b|} + \tau^{N-|a-b|}); \tag{2.11}$$

Che, nel limite di volume infinito, lasciando fissa la distanza fra i siti $|a-b| = r$, divengono

$$\frac{1}{N} \ln Z \xrightarrow[N \to +\infty]{} 2 \cosh \beta J = 2 \sqrt{\frac{1}{1-\tau^2}}; \tag{2.12}$$

$$\langle \sigma_a \sigma_{a+r} \rangle \xrightarrow[N \to +\infty]{} \tau^r; \tag{2.13}$$

$$\chi_{h=0} \xrightarrow[N \to +\infty]{} \frac{2\tau}{1-\tau} \tag{2.14}$$

Tali espressioni ci fanno comprendere che non avviene nessuna transizione di fase a temperatura finita $\tau \in (0,1)$. Il sistema, però, presenta una correlazione a lungo raggio per temperatura tendente a zero ($\tau \to 1$). Riesprimendo il parametro τ in termini della temperatura T (non è infatti possibile definire t, in quanto $T_c = 0$), ed effettuando i limiti per $T \to 0$, si trovano gli esponenti critici per questo sistema:

$$2 - \alpha = \gamma = \nu; \tag{2.15}$$

$$\beta = 0; \tag{2.16}$$

$$\delta = +\infty; \tag{2.17}$$

$$\eta = 1. \tag{2.18}$$

È istruttivo studiare questo modello al variare delle condizioni al bordo, come prescritto dal criterio di Ruelle, e quindi considerare catene aperte di spin, composte da $2N + 1$ unità, e porre, ad esempio, gli spin di bordo positivi, calcolando il valore di aspettazione dello spin centrale, parametro d'ordine del sistema. Dalla serie di alte temperature (facimente generalizzata al caso di spin di valore fissato) si trova

$$Z \cdot \langle \sigma_{N+1} \rangle = Z_{\mathrm{reg}} \cdot \left[(1 + \tau^N)^2 - (1 - \tau^N)^2 \right] = Z_{\mathrm{reg}} \cdot 4\tau^N \tag{2.19}$$

relazione che porta a conclusioni in accordo a quanto già trovato attraverso lo studio della fase simmetrica.

2.4 Un esempio di variabili all'infinito: il reticolo di Bethe.

Un altro esempio per il quale lo sviluppo di alte temperature è particolarmente efficace è il reticolo di Bethe. Esso è definito come l'unico reticolo infinito semplicemente connesso in cui ogni punto ha coordinazione q. Il caso particolare $q = 2$ è il reticolo di Ising unidimensionale appena discusso. Per ogni $q > 2$ si trova che il sistema è esattamente risolubile, e presenta transizione di fase a temperatura finita.

Il modello solitamente studiato in letteratura si interessa dei reticoli di volume finito troncati con la seguente prescrizione "standard": il reticolo $\mathcal{B}_n$ è quello che si ottiene da quello infinito scegliendo un sito centrale e rimuovendo tutti i siti che distano più di n passi. Per tale reticolo si studiano le proprietà locali delle variabili distanti dal bordo, costituito dai siti che distano esattamente n passi. La necessità di studiare le proprietà di volume, considerando sistemi in cui il bordo sia sempre più distante, è ormai chiara, alla luce di quanto detto nel capitolo 1. Essa però è di attuazione tutt'altro che banale per il nostro modello, in cui per ciascun reticolo troncato i siti di bordo sono una frazione macroscopica del volume.

Al fine di sfruttare al meglio le proprietà di autosomiglianza del reticolo, e risolvere più speditamente il problema, noi studieremo un modello molto simile a quello descritto sopra, in cui i reticoli sono troncati nel seguente modo (reticoli “puntati”): il reticolo $\mathcal{B}'_n$ è quello che si ottiene da quello infinito scegliendo un sito centrale σ_0, rimuovendo uno dei q rami che partono da esso, e rimuovendo tutti i siti sugli altri $q-1$ rami che distano più di n passi (confronta la figura 2.1 per un esempio dei due tipi di reticolo).

Studiamo questo sistema con condizioni al bordo alla Ruelle [2], scegliendo la fase con spin di bordo tutti positivi. Nel caso $q=3$ troviamo le seguenti equazioni ricorsive[3]:

$$Z(\mathcal{B}'_{n+1}) = Z(\mathcal{B}'_n)^2\,(1+\tau^2\langle\sigma_0\rangle^2_{\mathcal{B}'_n}); \tag{2.20}$$

$$Z(\mathcal{B}'_{n+1})\,\langle\sigma_0\rangle_{\mathcal{B}'_{n+1}} = Z(\mathcal{B}'_n)^2\,2\tau\langle\sigma_0\rangle_{\mathcal{B}'_n}; \tag{2.21}$$

Il rapporto fra le due equazioni ci fornisce una equazione ricorsiva per il solo $\langle\sigma_0\rangle$

$$\langle\sigma_0\rangle_{\mathcal{B}'_{n+1}} = \frac{2\tau\langle\sigma_0\rangle_{\mathcal{B}'_n}}{1+\tau^2\langle\sigma_0\rangle^2_{\mathcal{B}'_n}}; \tag{2.22}$$

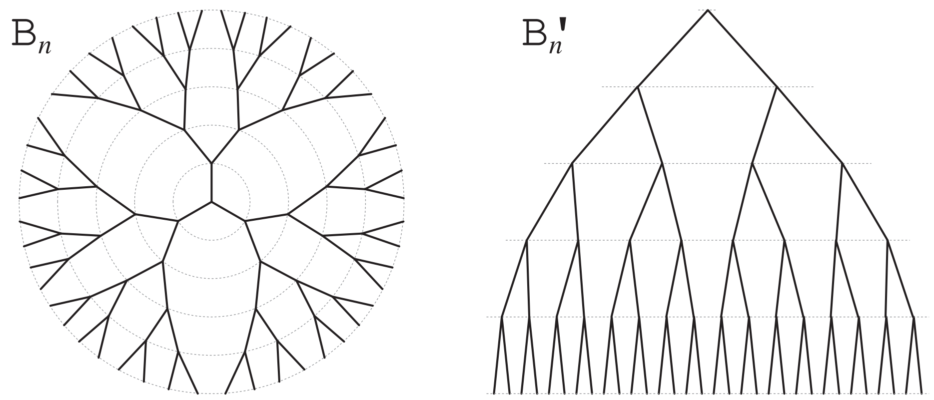
Nel limite $n\to\infty$, assumendo la convergenza ad un valore finito per l’aspettazione dello spin centrale, otteniamo l’equazione di punto fisso

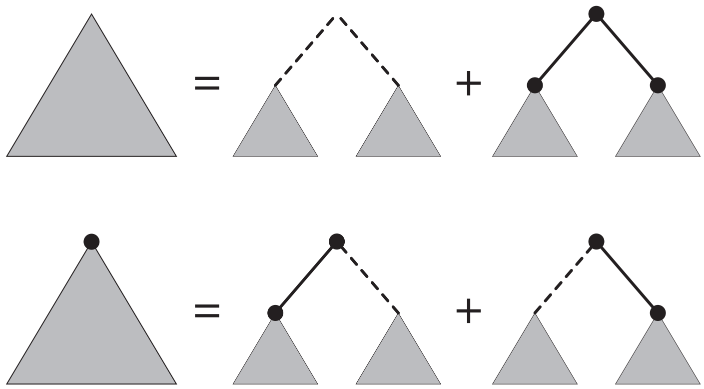
$$\langle\sigma_0\rangle = \frac{2\tau\langle\sigma_0\rangle}{1+\tau^2\langle\sigma_0\rangle^2}; \tag{2.23}$$

[2]Ricordiamo che il fatto che una frazione macroscopica delle variabili del sistema è costituita da variabili di bordo, rende il criterio di Ruelle meno fondato, e soltanto indicativo. In particolar modo non è chiaro se il fissare una frazione macroscopica degli spin, anziché selezionare una fase, e con essa uno stato di vuoto intorno a cui sviluppare, non ci allontani dal “reale” stato di vuoto.

[3]I casi con $q>3$ danno comportamento analogo, pur essendo più complicati.

Figura 2.1: *Reticoli di Bethe “standard” e “puntato” per* $q=1$.





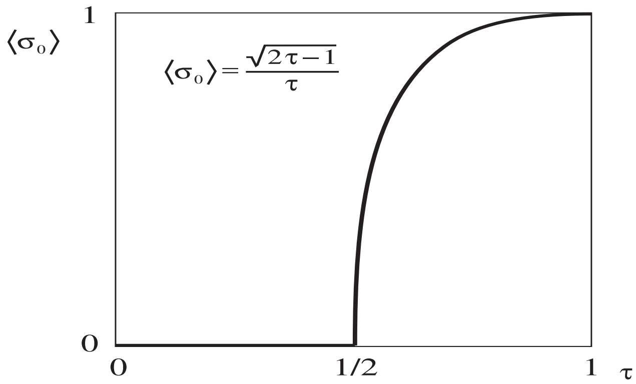
che ha come soluzioni

$$\langle\sigma_0\rangle = \begin{cases} 0 & \text{stabile per } \tau < \frac{1}{2}, \text{ instabile per } \tau > \frac{1}{2} \\ \sqrt{2\tau - 1} & \text{stabile per } \tau > \frac{1}{2} \end{cases} \tag{2.24}$$

Un simile comportamento era prevedibile, in quanto, in una espansione per τ piccoli, e per n finito, il primo termine che contribuisce al valore di aspettazione $\langle\sigma_0\rangle$ è la somma, su tutti i 2^n cammini che giungono fino al bordo, del peso τ^n, ed è quindi convergente a zero per $2\tau < 1$, e divergente per $2\tau > 1$.

Questo primo termine, però non tiene conto delle correzioni date dal "mare" di cammini che si chiudono sul bordo, confluenti nella funzione di partizione, ed il fatto che già esso da solo preveda una transizione di fase è indice del fatto che il ruolo delle altre variabili nel creare un ordine a lungo raggio è trascurabile.

Il valore dello spin assegnato al bordo si comporta a tutti gli effetti come una *variabile all'infinito*, che influenza spin lontani non attraverso l'azione



cooperativa degli spin interposti fra di essi, ma a causa di una non fisica divergenza esponenziale del numero di variabili di bordo con l'aumentare del raggio (mentre, in un reticolo fisico di dimensione D, essa diverge solo come $\sim r^{D-1}$).

Questo comportamento caratterizza anche l'importante modello di campo medio, descritto nella sezione seguente. Abbiamo studiato qui il modello di Bethe poiché per esso è forse più trasparente l'intervento di interazioni a lungo raggio con variabili all'infinito, che sarà responsabile dell'inattendibilità degli esponenti critici ottenuti con il campo medio.

2.5 Il campo medio.

Nei sistemi di meccanica statistica (escluso il caso di sistemi con interazione a lungo range, ad esempio quelli coulombiani) ogni variabile di sito interagisce sensibilmente con un campo esterno e con un numero limitato di variabili poste su siti adiacenti. Il modello di campo medio sostituisce quest'ultimo tipo di interazione con una media su tutte le variabili.

L'assunzione che un simile modello abbia caratteristiche affini ad un modello con interazione a corto raggio è strettamente legata all'assunzione che il valore medio assunto dalle variabili sia una buona approssimazione del valore mediato sui soli vicini. In generale questo è falso, poiché per i vicini si presentano delle fluttuazioni locali, che vengono invece cancellate dalla media. È oggi noto che, nel caso di sistemi di spin, il ruolo delle fluttuazioni nel governare il sistema nell'intorno del punto critico è determinante per dimensione del sistema minore di quattro, ed irrilevante per dimensione maggiore di quattro (inoltre per $D < D_<$ l'effetto delle fluttuazioni è talmente rilevante da rendere impossibile l'esistenza di una fase ordinata).

Passiamo adesso a definire e risolvere il nostro problema. Mentre per un problema di Ising tradizionale avremmo una hamiltoniana del tipo

$$H = \sum_i \Big(-h - J/2 \sum_{\substack{j \\ |i-j|=1}} \sigma_j \Big) \sigma_i; \tag{2.25}$$

l'hamiltoniana di campo medio che meglio approssima tale sistema sarà

$$H = \sum_i \Big(-h - \frac{qJ}{2N} \sum_j \sigma_j \Big) \sigma_i; \tag{2.26}$$

dove q è il numero di primi vicini sul reticolo originario, ed N il numero di siti. Il fattore $\frac{q}{N}$ è la correzione al parametro di interazione dovuta al fatto che adesso mediamo su tutti gli N spin, anziché sui soli q primi vicini.

In seguito a questa approssimazione tutti gli spin del sistema interagiscono con lo stesso *campo medio*, dato dal campo esterno originario più la magnetizzazione media $m = \frac{1}{N} \sum_j \sigma_j$. È proprio questa quantità che diverrà il parametro d'ordine del sistema, ed è un grande vantaggio che l'energia di una configurazione dipenda soltanto da essa:

$$H[\sigma] = Nm[\sigma]\left(-h - \frac{qJ}{2}m[\sigma]\right); \tag{2.27}$$

per cui possiamo facilmente ricavare il suo valore di aspettazione

$$Z = \sum_{p=0}^{N} \binom{N}{p} e^{\beta N\left(\frac{p}{N}-\frac{1}{2}\right)\left(h+\frac{qJ}{2}\left(\frac{p}{N}-\frac{1}{2}\right)\right)}; \tag{2.28}$$

$$Z\langle m\rangle = \sum_{p=0}^{N} \left(\frac{p}{N}-\frac{1}{2}\right)\binom{N}{p} e^{\beta N\left(\frac{p}{N}-\frac{1}{2}\right)\left(h+\frac{qJ}{2}\left(\frac{p}{N}-\frac{1}{2}\right)\right)} \simeq Z\cdot\left(\frac{p_{\max}}{N}-\frac{1}{2}\right); \tag{2.29}$$

dove $p_{\max}$ è il valore di p a cui corrisponde l'addendo più rilevante nell'espressione per la funzione di partizione. Questa approssimazione è lecita in quanto nella dipendenza da p degli addendi si hanno due od un picco (nei casi rispettivamente di simmetria rotta e non rotta), con semilarghezza $\sim N^{-\frac{1}{2}}$, e nel caso di simmetria rotta selezionare un massimo equivale a selezionare una fase. Troviamo così

$$\frac{\binom{N}{p_{\max}}\exp\left[\beta N\left(\frac{p_{\max}}{N}-\frac{1}{2}\right)\left(h+\frac{qJ}{2}\left(\frac{p_{\max}}{N}-\frac{1}{2}\right)\right)\right]}{\binom{N}{p_{\max}-1}\exp\left[\beta N\left(\frac{p_{\max}-1}{N}-\frac{1}{2}\right)\left(h+\frac{qJ}{2}\left(\frac{p_{\max}-1}{N}-\frac{1}{2}\right)\right)\right]} \simeq 1; \tag{2.30}$$

ovvero

$$\frac{N-p_{\max}+1}{p_{\max}} e^{\beta\left(h+qJ\frac{p_{\max}}{N}\right)} \simeq 1; \tag{2.31}$$

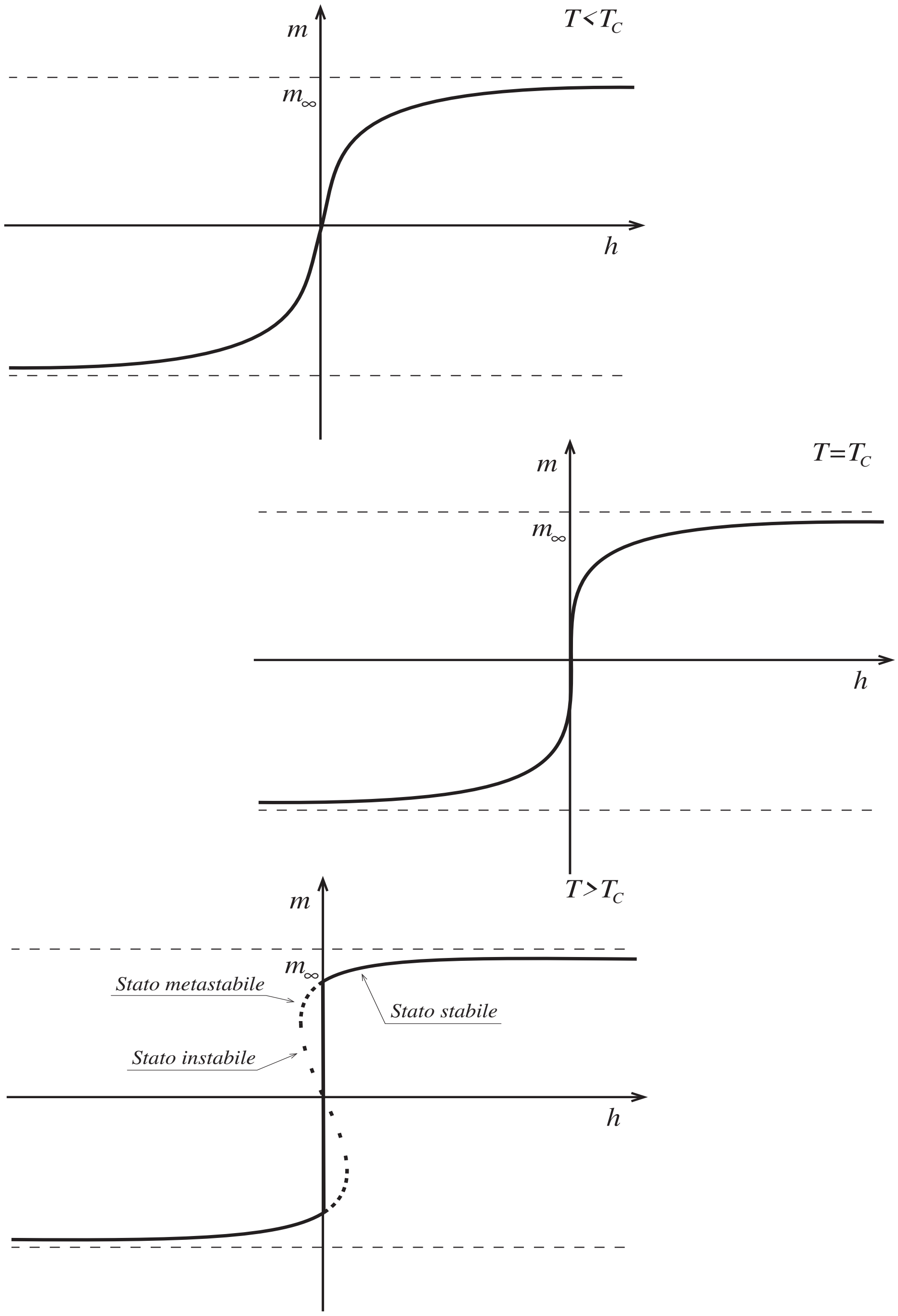
da cui otteniamo infine

$$m = \tanh\beta(qJm+h); \tag{2.32}$$

Come anticipato, tale equazione ha un'unica soluzione ad alte temperature (ad esempio, per $h=0$ e $\beta < \frac{1}{qJ}$), e tre soluzioni a basse temperature ($h=0$ e $\beta > \frac{1}{qJ}$), di cui una ($m=0$) instabile, e le rimanenti due stabili, corrispondenti ai due stati di magnetizzazione spontanea, che vanno l'uno nell'altro per rovesciamento di tutti gli spin (cfr. fig. 2.2). Per $h \neq 0$ i due picchi non sono più simmetrici, ed all'equilibrio verrà automaticamente selezionata la fase con magnetizzazione concorde al campo, mentre l'altra sarà metastabile.

Lo studio degli andamenti delle quantità di interesse fisico nell'intorno della regione critica ($h=0, \beta=\frac{1}{qJ}$) permette di trovare facilmente gli

Figura 2.2: *Magnetizzazione in funzione del campo esterno.*



esponenti critici di campo medio:

$$\alpha = 0; \tag{2.33a}$$
$$\beta = \tfrac{1}{2}; \tag{2.33b}$$
$$\gamma = \gamma' = 1; \tag{2.33c}$$
$$\delta = 3; \tag{2.33d}$$

È naturale che nel processo di media, che porta ciascuno spin ad interagire con tutto il campione, abbia perso di significato lo studio dell'andamento della funzione di correlazione con la distanza, e quindi non sono definiti gli esponenti ν e η.

2.6 Il modello gaussiano.

Abbandoniamo per un attimo i nostri modelli di spin, e passiamo ad un modello in cui le variabili possono assumere tutti i valori reali. Concentriamoci in particolare sul cosiddetto modello *gaussiano*, una variante del modello di Ising esattamente risolubile, che ha le stesse funzioni di correlazione del modello di Ising nell'approssimazione di campo medio, nella fase di alta temperatura.

Inquadriamo questi modelli in un'ottica più generale. Consideriamo delle variabili scalari $\varphi_i \in (-\infty, +\infty)$, una per ogni sito reticolare, con accoppiamento a primi vicini del tipo $J\varphi_i\varphi_j$ e ad un campo esterno del tipo $h\varphi_i$. In assenza di interazione e per campo esterno nullo ($J = h = 0$) si abbia una distribuzione di probabilità per le variabili

$$p(\varphi_i \in [\varphi, \varphi + d\varphi]) = P_0(\varphi)d\varphi; \qquad \int d\varphi P_0(\varphi) = 1; \tag{2.34}$$

che possiamo pensare originata da una lagrangiana locale

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{\beta}\sum_i U(\varphi_i); \tag{2.35}$$
$$P_0(\varphi) = e^{U(\varphi)}; \tag{2.36}$$
$$\lim_{\varphi\to\infty} \frac{U(\varphi)}{\varphi^2} = -\infty; \tag{2.37}$$

La condizione (2.37) assicura la buona definizione delle quantità fisiche (in particolar modo la convergenza della funzione di partizione) per ogni valore della temperatura. Essa può essere indebolita ponendo

$$\lim_{\varphi\to\infty} \frac{U(\varphi)}{\varphi^2} = -\frac{1}{\lambda} > 0; \tag{2.38}$$

che garantisce comunque le proprietà di convergenza richieste per tutto un intorno superiore di $\beta = 0$.

Per una distribuzione di probabilità del tipo $P_0(\varphi) = \delta(1-\varphi^2)$ si riottiene il modello di Ising. Il modello gaussiano è invece definito da $P_0(\varphi) = \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^{-1/2} e^{-\varphi^2/2\lambda}$. La costante di massa λ, a meno di riscalare i campi, può essere posta uguale ad uno. Il modello di Ginsburg-Landau, che ha distribuzione di probabilità del tipo $P_0(\varphi) \propto e^{-g(\varphi^2-1)^2-\varphi^2/2}$, è una via proposta per interpolare fra il modello gaussiano, esattamente risolubile, ($g=0$), ed il modello di Ising ($g=+\infty$).

Al fine di risolvere il modello gaussiano è cruciale l'utilizzo della formula per l'integrale gaussiano, che ricordiamo:

$$\int d\mathbf{v} \exp(-\tfrac{1}{2}\mathbf{v}^T J\,\mathbf{v} + \mathbf{h}^T\mathbf{v}) = \left(\det \frac{J}{2\pi}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp(\tfrac{1}{2}\mathbf{h}^T J^{-1}\,\mathbf{h}) \tag{2.39}$$

valida per matrici J definite positive.

La funzione di partizione per il modello gaussiano sarà infatti di questa forma, essendo data da

$$Z = \mathcal{A} \int d\Phi \exp(-\tfrac{1}{2}\Phi^T(-\beta\hat{J} + \tfrac{1}{\lambda})\,\Phi + \beta\,\mathbf{h}^T\Phi) \tag{2.40}$$

dove $\Phi = (\varphi_i)$; $\mathbf{h} = (h_i)$; $\hat{J}_{ij} = J\cdot\delta_{|i-j|-1}$; $\mathcal{A}$ è una semplice normalizzazione, e l'indice i conta i siti reticolari di un reticolo ipercubico di dimensione D, lato L, e condizioni periodiche al bordo. Notiamo che, grazie alla presenza del termine diagonale, ed alla coordinazione finita del reticolo (interazione a corto raggio), esiste tutto un intorno di $J=0$ (alte temperature) per cui la matrice $(-\beta\hat{J} + \frac{1}{\lambda})$ è definita positiva, per cui ha senso studiare questo modello per mezzo della formula (2.39) in tutto un intervallo di temperature.

L'operatore $\hat{J}$ si diagonalizza in trasformata di Fourier discreta, portando a

$$Z = \mathcal{A} \int \prod_{\mathbf{k}=\frac{(n_{x_1},\cdots,n_{x_D})}{L}} d\phi(\mathbf{k}) \exp\left[-\tfrac{1}{2}\phi(\mathbf{k})(-\beta\hat{J}(\mathbf{k}) + \tfrac{1}{\lambda})\,\phi(\mathbf{k}) + \beta\,h(\mathbf{k})\phi(\mathbf{k})\right]; \tag{2.41}$$

$$\hat{J}(\mathbf{k}) = J(\cos k_{x_1} + \cdots + \cos k_{x_D}); \tag{2.42}$$

Quindi, eseguendo l'integrale gaussiano, facilitato dalla diagonalizzazione dell'operatore quadratico nei campi, si trova

$$Z = \mathcal{A} \prod_{\mathbf{k}} \left[\left(\frac{\lambda^{-1} - \beta\hat{J}(\mathbf{k})}{2\pi}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{1}{2}\frac{h(\mathbf{k})^2}{\lambda^{-1} - \beta\hat{J}(\mathbf{k})}\right)\right]; \tag{2.43}$$

$$F = -\frac{1}{\beta}\left\{\ln\mathcal{A} - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}\left(\ln\frac{\lambda^{-1} - \beta\hat{J}(\mathbf{k})}{2\pi} - \frac{h(\mathbf{k})^2}{\lambda^{-1} - \beta\hat{J}(\mathbf{k})}\right)\right\}; \tag{2.44}$$

La seconda espressione passa facilmentre al limite termodinamico

$$F = -\frac{1}{\beta}\left\{\ln\mathcal{A} - \frac{1}{2}\int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^{D/2}}\left(\ln\frac{\lambda^{-1}-\beta\hat{J}(\mathbf{k})}{2\pi} - \frac{h(\mathbf{k})^2}{\lambda^{-1}-\beta\hat{J}(\mathbf{k})}\right)\right\}; \tag{2.45}$$

Notiamo che tale funzione diventa singolare per $D\beta J \geq \lambda^{-1}$. È comunque possibile studiare l'intorno superiore (in t) della singolarità. Si ottengono così gli esponenti critici per il modello gaussiano in dimensione D, prototipo di una importante classe di universalità, nota col nome di *punto fisso gaussiano*. Ricordiamo, però, che per $D < 4$ il modello di Ising, così come il modello di Ginsburg-Landau per $g > 0$, appartengono ad un'altra classe, nota col nome di *modelli* ϕ^4, e quindi una classe di universalità fondamentale per la fisica quale quella dei sistemi con interazione a corto raggio in $D = 3$, sfugge ancora ad una soluzione esatta (non perturbativa).

2.7 Random walks e modello gaussiano.

Consideriamo il problema di random walks liberi (cfr. l'appendice A) su reticolo ipercubico in dimensione D, di lato $N^{1/D}$, con matrice di transfer a primi vicini con condizioni al bordo toroidali

$$M_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} = \tau\cdot\sum_{i=1}^{D}(\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'+\hat{\eta}_i)+\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'-\hat{\eta}_i)) = \tau\cdot\delta(|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|-1); \tag{2.46}$$

$$\mathbf{x} \equiv \mathbf{x} + N^{1/D}\hat{\eta}_i; \tag{2.47}$$

ovvero l'ensemble dei cammini chiusi non orientati liberi, dove i cammini che escono da una faccia rientrano dalla faccia opposta. Ciascuna configurazione sarà composta da un insieme di cammini chiusi, ed il peso ad essa attribuito sarà τ^L, dove L è il numero complessivo di passi compiuti dai cammini sul reticolo.

Utilizzando quanto visto all'appendice A, è facile calcolare la funzione di partizione per il nostro sistema:

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{\Omega} \tau^{L(\Omega)} = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{1}{2^k k!} \sum_{\Omega=\{\omega_1,\cdots,\omega_k\}} \tau^{L(\omega_1)+\cdots+L(\omega_k)} \\
&= \exp \frac{1}{2} \sum_{\omega} \tau^{L(\omega)};
\end{aligned}
\tag{2.48}
$$

$$
\begin{aligned}
F &= \frac{1}{2} \sum_{\omega} \tau^{L(\omega)} = \frac{1}{2} \sum_{L} \frac{1}{L} \sum_{a} \sum_{\substack{\omega: a \to a \\ |\omega|=L}} \tau^{L}) = -\frac{1}{2} \operatorname{tr} \ln(I - M) \\
&= -\frac{1}{2} \ln \det(I - M);
\end{aligned}
\tag{2.49}
$$

$$
\tag{2.50}
$$

Confrontiamo adesso questo risultato con l'espressione formale per il modello gaussiano a campo esterno nullo. Dalla formula per l'integrale gaussiano (2.39) troviamo

$$
Z = \left(\det \frac{\lambda^{-1} - \beta J}{2\pi} \right)^{-\frac{1}{2}}; \tag{2.51}
$$

$$
F = \frac{1}{2\beta} \left(\frac{\lambda^{-1}}{2\pi} \right)^{-\frac{N}{2}} \det(\mathbf{1} - \lambda \beta J); \tag{2.52}
$$

$$
J_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} = J \cdot \delta(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| - 1); \tag{2.53}
$$

Abbiamo così trovato che i due sistemi hanno energie libere identiche, a meno di riscalare le quantità in gioco. In realtà si verifica che anche le funzioni di correlazione sono identiche. Il procedimento da seguire è analogo a quello visto sopra, soltanto più tedioso. Per la funzione di correlazione a due punti si trova, nel limite di volume infinito, un andamento del tipo:

$$
\langle \varphi_{\mathbf{r}_1} \varphi_{\mathbf{r}_2} \rangle = \int_0^{2\pi} \cdots \int_0^{2\pi} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^{D/2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \frac{1}{1 - \tau \sum_{i=1}^{D} \cos \mathbf{k} \cdot \hat{\eta}_i}; \tag{2.54}
$$

Si trova inoltre che le funzioni di correlazione a quattro o più punti fattorizzano sui possibili prodotti di funzioni a due punti.

Capitolo 3

Linked Cluster Expansion per il modello di Ising.

Dato un sistema con variabili di campo scalari, è interessante studiare l'espansione in serie per l'energia libera e le funzioni di correlazione connesse, nell'intorno di una teoria disaccoppiata retta da una lagrangiana locale $\mathcal{L}_0$, in termini di un parametro d'interazione K che accoppia i primi vicini. L'introduzione di una interazione a corto raggio per variabili disposte su un reticolo D-dimensionale, infatti, porta il sistema ad avere un comportamento critico della stessa classe di universalità di quello di tanta parte dei fenomeni critici osservati in natura, per sistemi di dimensionalità pari a D.

Questo sviluppo in serie, detto "serie di alte temperature"[1], si è imposto negli ultimi anni come uno dei più efficaci strumenti di carattere computazionale nello studio di sistemi fisici nell'intorno di un punto critico.

Le ragioni teoriche di questo successo sono date dalle ottime proprietà di analiticità delle serie, il cui raggio di convergenza spesso raggiunge la criticalità dall'alto.

Ragioni più pratiche sono l'evoluzione di diversi stratagemmi, che, attraverso processi di "rinormalizzazione" della semplice espansione in serie, permettono di risommare analiticamente il contributo di gran parte dei termini, lasciando al calcolatore il solo compito di generare ordine per ordine una classe relativamente ristretta di grafi. Il complesso di tali procedimenti va sotto il nome di *Linked Cluster Expansion* (LCE).

Esiste una vasta letteratura in proposito, dall'articolo "storico" di M. Wortis [14], fino ad una recente rilettura, sintetica e con notazioni più conformi alla restante parte di questa tesi, in [13]. Una analisi specializzata a modelli di spin si trova in [15].

[1] Alte rispetto all'unica altra scala di energia del sistema, il parametro K, appunto.

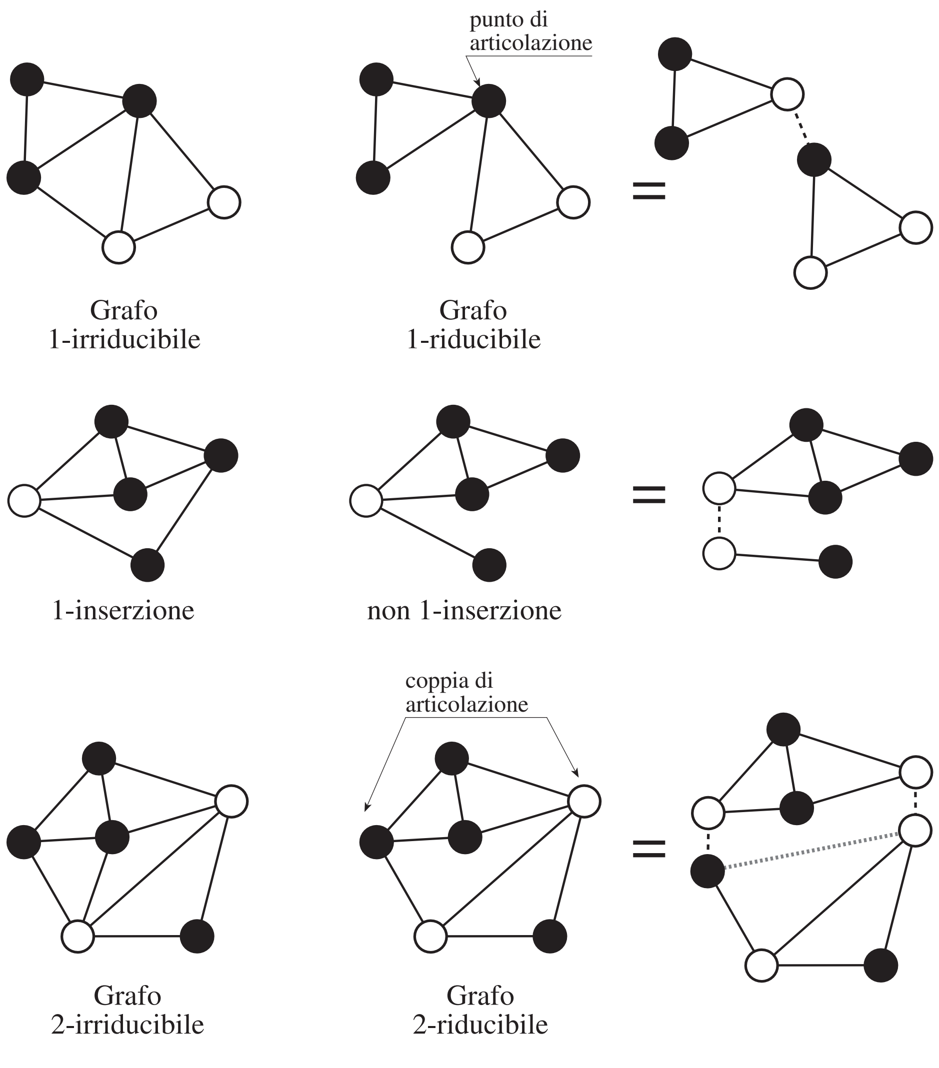
3.1 Concetti utili di teoria dei grafi.

Riteniamo conveniente introdurre in una sezione apposita tutti i concetti di teoria dei grafi necessari per la LCE, e le scelte di nomenclatura per essi adottate in questo capitolo.

Il lettore già introdotto all'argomento troverà forse vantaggioso saltare questa sezione in prima lettura, e tornare indietro a consultarla quale glossario.

Un *grafo* $\mathcal{G}$ è un insieme di *vertici* $i = 1, \cdots, v$ e di *legami* (anche bonds, links od edges in letteratura) $l = 1, \cdots, e$, dove un legame è una coppia non

Figura 3.1: *Glossario illustrato delle nozioni di teoria dei grafi utili per la LCE.*



ordinata di vertici. Un *grafo orientato* è un grafo dove i legami consistono in coppie orientate di vertici Chiameremo $n(i)$ la coordinazione del vertice i, ovvero il numero di bond che insistono su di esso. Introdurremo la naturale nozione di connessione per i grafi: due grafi sono connessi se ogni coppia di vertici può essere congiunta da un cammino sui bond del grafo.

Ai fini della LCE sarà utile lavorare con grafi che hanno vertici di due tipi diversi: *vertici esterni* (o radici) ed *interni.* Visto che nel corso del procedimento si eseguono delle somme al variare delle posizioni dei vertici interni, lasciando fissi quelli esterni, diremo grafi *r-puntati* a v vertici i grafi che possiedono r vertici esterni e $v-r$ vertici interni. Nella rappresentazione grafica adotteremo piccoli dischi vuoti per i vertici esterni e pieni per quelli interni.

L'occorrenza di somme di questo tipo rende utile introdurre una nozione un po' particolare di *isomorfismo* fra i nostri grafi. Ad ogni grafo corrisponde una matrice delle adiacenze A, definita come quella matrice che alle entrate (i,j) assume il valore uno se esiste un bond fra i punti i e j, e zero altrimenti. In genere si definiscono due grafi *isomorfi* se esiste una permutazione che, applicata per similitudine alla matrice delle adiacenze di uno dei grafi, restituisce quella dell'altro grafo, ovvero per cui

$$\mathcal{G} \sim \mathcal{G}' \Longleftrightarrow \exists \;\; P \in \mathfrak{S}_v \;/\; P^\dagger A_\mathcal{G} P = A_{\mathcal{G}'} \tag{3.1}$$

Nel nostro caso, invece, definiremo isomorfi soltanto quelle coppie di grafi per cui la (3.1) vale con una permutazione dei *soli* vertici interni. Nelle nostre famiglie di grafi, anziché mantenere distinti grafi isomorfi, li identificheremo, e terremo memoria del numero originario di grafi isomorfi in un *fattore di simmetria* $S(\mathcal{G})$.

Chiamiamo $\mathcal{T}^{(r,0)}$ l'insieme dei grafi r-puntati connessi, a meno di isomorfismi[2].

Definiamo una operazione di *rimozione* per i vertici di un grafo specificando che un grafo da cui venga rimosso il punto i è il grafo di partenza, privato del punto stesso, e di tutti i bond che giungevano su di esso. Tale operazione può occasionalmente disconnettere il grafo.

Chiamiamo *punto di articolazione* un punto la cui rimozione crea delle porzioni connesse, di cui almeno una priva di vertici esterni, ed almeno un'altra che invece ne contenga. Chiamiamo inoltre un grafo puntato 1-*irriducibile* se non contiene punti di articolazione.

Chiamiamo $\mathcal{T}^{(r,1)}$ l'insieme dei grafi r-puntati 1-irriducibili.

Un grafo 1-puntato connesso è detto una 1-*inserzione* se rimuovendo la radice rimane connesso. Chiamiamo $\mathcal{T}^{(1,0)}_{n,\text{in}}$ l'insieme delle 1-inserzioni con radice di coordinazione n.

[2] Quest'ultima proprietà sarà sottointesa in tutte le famiglie di grafi introdotte in seguito.

Chiamiamo *coppia di articolazione* una coppia di punti di un grafo puntato la cui rimozione crea delle porzioni connesse, di cui almeno una priva di vertici esterni, ed almeno un'altra che invece ne contenga, o una coppia di punti congiunti da più di un bond. Chiamiamo inoltre un grafo puntato 2-*irriducibile* se non contiene coppie di articolazione.

Chiamiamo $\mathcal{T}^{(r,2)}$ l'insieme dei grafi r-puntati 1-irriducibili.

Al fine di una più rapida consultazione, queste ultime definizioni sono riassunte con degli esempi in figura (3.1).

3.2 Espansione semplice.

In questa sezione esporremo, senza dimostrarle, le formule che riassumono l'espansione di alte temperature per le funzioni connesse a q punti, ovvero

$$G_q(x_1, \cdots, x_q) = \langle \sigma_{x_1}, \cdots, \sigma_{x_q} \rangle_{(h=0)}^{\text{connesse}} = -\beta \frac{\partial^q F(K, h_i)}{\partial h_1 \cdots, \partial h_q}\bigg|_{h=0}; \tag{3.2}$$

$$e^F = \int \prod d\varphi_i e^{-\beta H[\varphi_i]}; \tag{3.3}$$

con particolare riguardo al caso $q = 0$, energia libera del sistema, e $q = 2$, funzione di correlazione $\langle \varphi_i \varphi_j \rangle$, nel caso di reticolo Λ D-dimensionale, che goda di simmetria per traslazioni discrete ed inversione su ogni sito reticolare.

L'algoritmo LCE si applica a modelli con lagrangiane che contengano variabili di campo scalari, una per sito reticolare, con interazione a primi vicini ed accoppiamento lineare ad un campo esterno generico, ed abbiano come parte di autointerazione (cioè lagrangiana della parte locale della teoria, che sta alla base dello sviluppo) una arbitraria funzione pari ad andamento strettamente maggiore che quadratico, ovvero per fattori di Gibbs del tipo

$$-\beta H = \sum_{\varphi_i} (U(\varphi_i) + h_i \varphi_i) + \sum_{\varphi_i, \varphi_j} K \, \varphi_i \, \varphi_j; \tag{3.4}$$

$$\lim_{\varphi \to \infty} \frac{U(\varphi)}{\varphi^2} = -\infty; \qquad \int d\varphi \; e^{U(\varphi)} = 1;$$

Introduciamo delle quantità chiamate semi-invarianti semplici (bare semi-invariants), o momenti cumulanti, definiti per mezzo della funzione generatrice

$$e^{\sum \frac{\mu_0(2n)}{(2n)!} h^{2n}} = \int d\varphi \; e^{U(\varphi) + h\varphi} \tag{3.5}$$

Il calcolo di tali quantità è in generale abbastanza complesso, coinvolgendo lo sviluppo in serie di Taylor del logaritmo di una trasformata di Laplace. È interessante analizzare anche il caso di lagrangiana di autointerazione quadratica, ovvero per il modello gaussiano, seppure questo caso appartenga al bordo del dominio delle lagrangiane ammesse, ma non al dominio[3] . I semi-invarianti per il modello gaussiano hanno una forma particolarmente elementare:

$$\mu_0(2) = 1; \qquad\qquad \mu_0(n \neq 2) = 0; \tag{3.6}$$

in quanto

$$\int d\varphi \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\varphi^2}{2}+h\varphi} = e^{\frac{h^2}{2}} \tag{3.7}$$

Introduciamo inoltre dei fattori che confluiranno nel peso da attribuire a ciascun grafo. Definiamo il fattore di vertice esterno semplice (bare external vertex factor) per un grafo r-puntato $\mathcal{G}$:

$$V_0^{(\mathrm{e})}(n_1, \cdots, n_r; \mathcal{G}) = \prod_{i=1}^{r} \mu_0(n(i) + n_i) \xrightarrow[\text{gauss.}]{} \prod_{i=1}^{r} \delta_{n(i)+n_i-2}; \tag{3.8}$$

definiamo inoltre un fattore di vertice interno semplice

$$V_0^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G}) = \prod_{i=r+1}^{v} \mu_0(n(i)) \xrightarrow[\text{gauss.}]{} \prod_{i=r+1}^{v} \delta_{n(i)-2}; \tag{3.9}$$

ed infine un fattore di legame semplice (bare edge factor):

$$L_0(x_1, \cdots, x_v; \mathcal{G}) = K^e \cdot \delta_{\text{adj. check}}; \tag{3.10}$$

dove con $\delta_{\text{adj. check}}$ si intende una funzione (check di adiacenza) che restituisce uno se, una volta descritta l'immersione dei punti $i = 1, \cdots, r$ del grafo sui siti reticolari $(x_1, \cdots, x_v)$, tutti i bond del grafo sono anche bond del reticolo, e zero altrimenti.

Sono ammesse tutte le mappe di immersione, anche quelle che portano punti distinti del grafo nello stesso sito reticolare (condizione di *free embedding*). Rimarchiamo questa proprietà poiché essa avrà un ruolo cruciale nel seguito.

È conveniente introdurre un passo intermedio nello sviluppo, risommando intanto il prodotto di questi fattori sulle varie realizzazioni. Introduciamo

[3]Fuori dal dominio non è garantita la convergenza e una buona definizione della funzione di partizione a tutte le temperature. Sappiamo già, infatti, che alla temperatura critica, quella per cui il propagatore libero diventa singolare, anche la forma quadratica che compare nell'integrale gaussiano non è più definita positiva, e l'integrale che definisce Z diverge.

la funzione ausiliaria ad r punti (auxiliary r-point function):

$$
\begin{aligned}
& X_r(x_1,\cdots,x_r;n_1,\cdots,n_r) = \\
& \quad = \sum_{\mathcal{G}\in\mathcal{T}^{(r,0)}} \sum_{x_1,\cdots,x_v} \frac{V_0^{(\mathrm{e})}(n_1,\cdots,n_r;\mathcal{G}) V_0^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G}) L_0(x_1,\cdots,x_v;\mathcal{G})}{S(\mathcal{G})} \\
& \quad = \sum_{\mathcal{G}\in\mathcal{T}^{(r,0)}} \left(\frac{V_0^{(\mathrm{e})}(n_1,\cdots,n_r;\mathcal{G}) V_0^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G})}{S(\mathcal{G})} \sum_{x_1,\cdots,x_v} L_0(x_1,\cdots,x_v;\mathcal{G}) \right)
\end{aligned} \tag{3.11}
$$

dove abbiamo isolato il fattore che conta il numero di realizzazioni del grafo $\mathcal{G}$ sul reticolo, mantenendo fisse le posizioni delle radici, e pesando ciascuna con un fattore $K^{e(\mathcal{G})}$. Chiameremo tale numero $E(x_1,\cdots,x_r;\mathcal{G})$. Riscriveremo quindi

$$
\begin{aligned}
& X_r(x_1,\cdots,x_r;n_1,\cdots,n_r) = \\
& \quad = \sum_{\mathcal{G}\in\mathcal{T}^{(r,0)}} \frac{V_0^{(\mathrm{e})}(n_1,\cdots,n_r;\mathcal{G}) V_0^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G}) K^{e(\mathcal{G})} E(x_1,\cdots,x_r;\mathcal{G})}{S(\mathcal{G})}
\end{aligned} \tag{3.12}
$$

Fin qui abbiamo soltanto introdotto delle quantità astratte. La formula seguente lega tali quantità alle quantità fisiche di interesse, ovvero le funzioni a q punti $G_q(x_1,\cdots,x_q)$. Noi non la dimostreremo. La dimostrazione è solo un faticoso esercizio di combinatoria, per identificare la formula con lo sviluppo in serie di Taylor nella costante di accoppiamento delle G_q.

$$
G_q(x_1,\cdots,x_q) = \sum_{\substack{\text{partizioni} \\ \{1,\cdots,q\}\to\left\{\substack{\{i_{11},\cdots,i_{1u_1}\} \\ \{i_{r1},\cdots,i_{ru_r}\}}\right\}}} X_r(x_{i_{11}},\cdots,x_{i_{r1}};u_1,\cdots,u_r) \prod \delta(x_{i_{lk}} = x_{i_{lk'}}) \tag{3.13}
$$

Nel caso particolare del modello gaussiano questa complessa sommatoria si semplifica molto. Infatti affinché non si annulli $V_0^{(\mathrm{e})}$ si deve avere $u_i = 0,1$, ma le u_i sono le cardinalità delle parti, quindi devono essere interi positivi. Abbiamo quindi

$$
G_q(x_1,\cdots,x_q) = X_q(x_1,\cdots,x_q;u_i=1) \tag{3.14}
$$

ed inoltre

$$
\begin{aligned}
& X_r(x_1,\cdots,x_r;n_i=1) = \\
& \quad = \sum_{\mathcal{G}\in\mathcal{T}^{(r,0)}} \frac{\prod_{i=1}^r \delta_{n(i)-1} \cdot \prod_{i=r+1}^v \delta_{n(i)-2}\, K^{e(\mathcal{G})}\, E(x_1,\cdots,x_r;\mathcal{G})}{S(\mathcal{G})}
\end{aligned} \tag{3.15}
$$

in quanto tutti i vertici interni hanno coordinazione due, e tutti quelli esterni coordinazione uno. Da breve analisi segue che le funzioni connesse a q punti sono nulle per $q \geq 4$, e che le espressioni per l'energia libera e la funzione di correlazione a due punti si risommano in maniera esatta. Alla prima contribuiscono soltanto i cammini chiusi liberi, (o, nel linguaggio usato, free-embedded). Il fattore di simmetria per essi è pari al numero di passi L. Chiamando $\{\omega_{x_i \to x_j}\}$ l'insieme dei cammini liberi dal punto x_i al punto x_j, si ha

$$F = -\frac{1}{\beta} \sum_{x_i} \sum_{L \geq 1} \frac{1}{L} \sum_{\substack{\omega_{x_i \to x_i} \\ |\omega| = L}} K^L \tag{3.16}$$

Alla seconda, invece, contribuiscono solo i cammini aperti che congiungono i due punti, ed il fattore di simmetria è uno. Quindi

$$\langle \varphi_i \, \varphi_j \rangle_{h=0} = \sum_{L \geq 1} \sum_{\substack{\omega_{x_i \to x_j} \\ |\omega| = L}} K^L \tag{3.17}$$

Abbiamo così ritrovato il fatto noto che il caso gaussiano è esattamente risolubile, ed è esprimibile come un gas perfetto di cammini chiusi su reticolo.

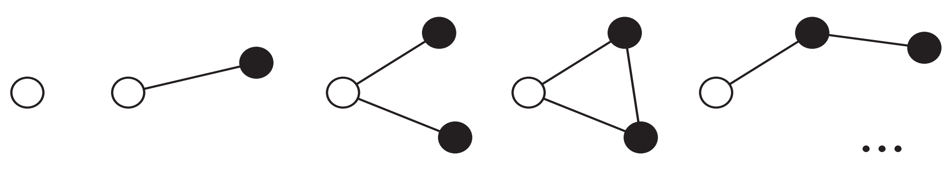
Comunque, anche al di là del banale modello gaussiano, le funzioni a q punti hanno espressioni ragionevolmente semplici per q bassi. In particolare

$$G_0 = X_0; \tag{3.18}$$
$$G_2(x_i, x_j) = X_2(x_i, x_j; 1, 1) + \delta_{x_i - x_j} X_1(x_i; 2); \tag{3.19}$$

3.3 Rinormalizzazione di vertice.

Consideriamo l'espansione diagrammatica della funzione ausiliaria X_1, rappresentata in figura 3.2:

Figura 3.2: *Primi termini di espansione per* X_1.



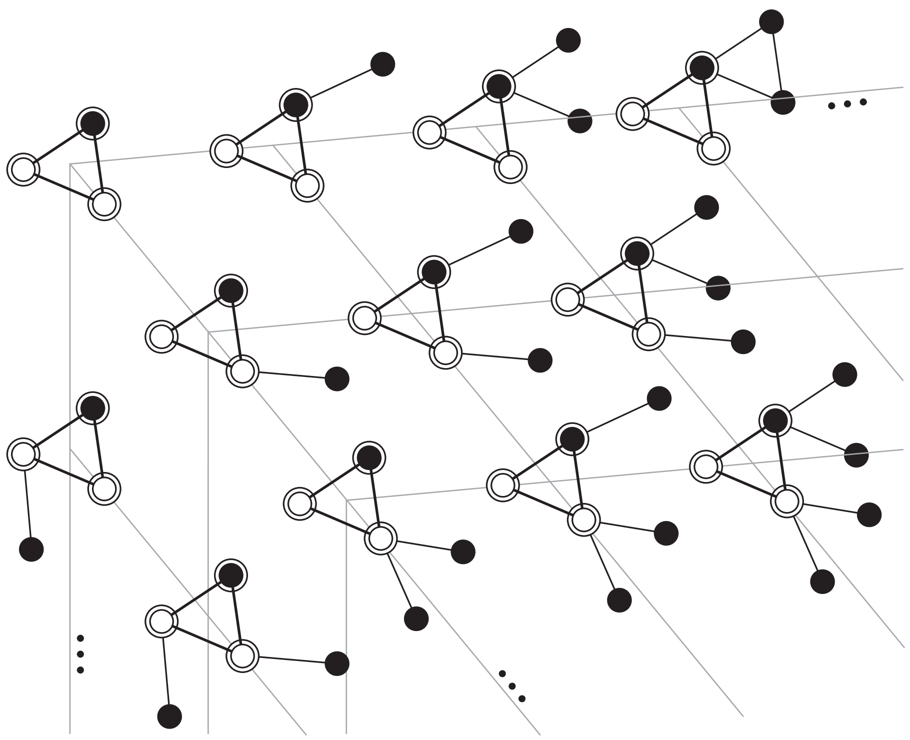
Consideriamo adesso l'insieme di grafi 2-puntati in figura 3.3 (è stato scelto un esempio arbitrario). Osservando la figura si ha la forte tentazione di raccogliere tutti i termini che in essa compaiono in un unico grafo in qualche senso "irriducibile", sui vertici del quale possono essere innestati dei grafi dello sviluppo di X_1, scelti in tutte le combinazioni possibili. Forse, anziché sommare su tutti i grafi, ci basterà sommare soltanto su questi grafi irriducibili, rinormalizzando il contributo di ciascun vertice. Questa idea naïve funziona alla perfezione, anche grazie al già citato free embedding, per cui i contributi di ciascun innesto danno pesi indipendenti dalla restante parte del grafo.

Una attenta analisi ci fa scoprire che la classe dei grafi "irriducibili" nel senso che necessita a noi è proprio la classe dei grafi 1-irriducibili, definiti alla sezione 3.1, e che il contributo dei vertici va rinormalizzato eseguendo la sostituzione

$$\mu_0(n) \to \mu(n) = X_1(x, n) = X_1(n) \tag{3.20}$$

dove la $X_1(n)$ è calcolata con i vecchi semi-invarianti. Al contempo, le nuove

Figura 3.3: *Una illuminante selezione di grafi appartenenti allo sviluppo di X_2.*



formule per le funzioni ausiliarie a r punti diverranno

$$V_1^{(\mathrm{e})}(n_1,\cdots,n_r;\mathcal{G})=\prod_{i=1}^{r}\mu(n(i)+n_i); \tag{3.21}$$

$$V_1^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G})=\prod_{i=r+1}^{v}\mu(n(i)); \tag{3.22}$$

$$\begin{aligned}
&X_r(x_1,\cdots,x_r;n_1,\cdots,n_r)=\\
&=\sum_{\mathcal{G}\in\mathcal{T}^{(r,1)}}\frac{V_1^{(\mathrm{e})}(n_1,\cdots,n_r;\mathcal{G})V_1^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G})K^{e(\mathcal{G})}E(x_1,\cdots,x_r;\mathcal{G})}{S(\mathcal{G})}
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Il processo di rinormalizzazione dei vertici è infinito. Quindi va troncato ad un ordine consistente con il troncamento nell'enumerazione dei grafi in $\mathcal{T}^{(r,1)}$. Il procedimento adottato prevede di definire dei *momenti rinormalizzati*

$$q(n)=\sum_{\mathcal{G}\in\mathcal{T}_{n,\mathrm{in}}^{(1,0)}}\sum_{x_2,\cdots,x_v}\frac{V_0^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G})L_0(x_1,\cdots,x_v;\mathcal{G})}{S(\mathcal{G})}=\mathcal{O}(K^n) \tag{3.24}$$

ma, per lo stesso processo di rinormalizzazione dei vertici descritto sopra, deve valere anche

$$q(n)=\sum_{\mathcal{G}\in\mathcal{T}_{n,\mathrm{in}}^{(1,0)}\cap\mathcal{T}^{(1,1)}}\sum_{x_2,\cdots,x_v}\frac{V_1^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G})L_0(x_1,\cdots,x_v;\mathcal{G})}{S(\mathcal{G})} \tag{3.25}$$

Adesso possiamo usare l'intuitiva identità, che esprime il fatto che un innesto può essere composto di un numero arbitrario di rami distinti, dove i rami sono le 1-inserzioni[4], per cui

$$\mu(n)=\mu_0(n)+\sum_{s=1}^{+\infty}\frac{1}{s!}\sum_{l_1,\cdots,l_s\geq 1}q(l_1)\cdots q(l_s)\mu_0(n+l_1+\cdots+l_s) \tag{3.26}$$

Le (3.25, 3.26), troncate nello sviluppo in potenze di K, possono quindi essere risolte in parallelo fino ad un ordine arbitrario.

Ricordiamo che le μ_0 non nulle sono quelle con argomento pari; inoltre dalla (3.24) troviamo che tale proprietà vale anche per le q, e quindi, dalla (3.26) concludiamo che vale anche per le μ.

3.4 Rinormalizzazione di linea.

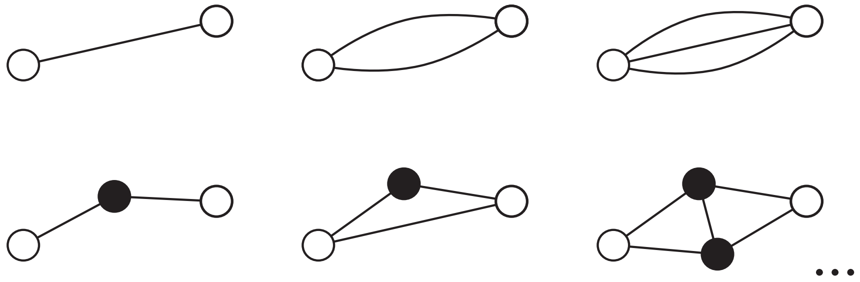
Così come è stato possibile fattorizzare via tutti i possibili "innesti" ancorati per un solo punto alla parte del grafo contenente le radici, sostituendoli con

[4] Vedi anche figura 3.1.

un peso rinormalizzato per i vertici, è anche possibile fattorizzare tutti i "ponti" fra due punti della parte del grafo contenente le radici. Al fine di non avere ambiguità sul modo di innestare questi ponti, immagineremo il grafo orientato, ad esempio orientando ciascun bond nella direzione del vertice labellato dall'indice più alto.

Infatti, in analogia a quanto fatto alla sezione precedente, possiamo considerare l'espansione diagrammatica in grafi di $\mathcal{T}^{(r,1)}$ della funzione ausiliaria X_2, rappresentata in figura 3.4:

Figura 3.4: *Primi termini di espansione in grafi di* $\mathcal{T}^{(r,1)}$ *per* X_2.



Intuitivamente si potrebbe pensare all'esistenza di una famiglia di grafi ancora più "irriducibili" dei grafi 1-irriducibili, dove ogni termine raccoglie insieme tutti quei grafi che al posto di ciascun bond hanno uno a scelta fra i grafi dell'espansione di X_2. Dal punto di vista della semplice decomposizione in grafi, questa idea giunge in porto senza difficoltà. Come prevedibile, la famiglia di grafi ancora più irriducibili è proprio l'insieme $\mathcal{T}^{(r,2)}$ dei grafi 2-irriducibili. Il peso da assegnare a ciascun grafo, però, non fattorizza in maniera elementare (i pesi $V_1^{(\mathrm{e})}$ si comportano male), e ci obbliga a trattare in maniera differente i grafi 2-irriducibili che hanno coordinazione diversa sulle radici.

Per questa ragione è comodo, prima di passare alla rinormalizzazione vera e propria, suddividere i contributi ad una data $X_{r>1}$ nei contributi di nuove funzioni *preausiliarie* W_r, definite come

$$W_r(x_1, \cdots, x_r; n_1, \cdots, n_r) = \sum_{\mathcal{G} \in \mathcal{T}^{(r,1)}_{n_1, \cdots, n_r}} \sum_{x_{r+1}, \cdots, x_v} \frac{V_1^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G}) L_0(x_1, \cdots, x_v; \mathcal{G})}{S(\mathcal{G})} \tag{3.27}$$

per cui la X_r si riscrive

$$X_r(x_1, \cdots, x_r; n_1, \cdots, n_r) = \sum_{s_1, \cdots, s_r} \left[\prod_{i=1}^{r} \mu(n_i + s_i) \right] W_r(x_1, \cdots, x_r; s_1, \cdots, s_r) \tag{3.28}$$

Studiando le W_r possiamo trattare in maniera indipendente grafi con coordinazione diversa sulle radici.

In particolar modo possiamo attuare l'attesa rinormalizzazione. Ovvero scriviamo W_r come somma: *(1)* su tutti i grafi 2-irriducibili; *(2)* sulle posizioni di eventuali vertici interni; *(3)* (implicitamente) sulle possibili scelte di grafi di W_2 con cui rinormalizzare ciascun bond; del peso dato dal prodotto di: *(1)* un check di consistenza sulle coordinazioni delle radici, che controlla che tutte le n_i fra gli argomenti di W_r siano uguali alle coordinazioni ν_i ottenute dalla conoscenza delle coordinazioni i_l, f_l delle radici di ciascun "ponte" innestato al posto dei bond; *(2)* un peso rinormalizzato per i vertici interni del grafo 2-irriducibile, rinormalizzato perché anche le coordinazioni di questi vertici si ottengono dalla conoscenza delle coordinazioni i_l, f_l delle radici di ciascun ponte; *(3)* un fattore di legame rinormalizzato, il vero protagonista della rinormalizzazione, che attribuisce alla strana entità "bond orientato con coordinazioni alle radici pari a i_l, f_l", la somma dei contributi di tutti i grafi di X_2, con coordinazioni alle radici pari a i_l ed f_l; *(4)* il tradizionale fattore di simmetria per il grafo 2-irriducibile. In formule:

$$W_r(x_1, \cdots, x_r; n_1, \cdots, n_r) = \sum_{\mathcal{G} \in \mathcal{T}^{(r,1)}} \sum_{\substack{x_{r+1}, \cdots, x_v \\ i_1, \cdots, i_e \\ f_1, \cdots, f_e}} \delta_{\binom{\text{valence}}{\text{compat.}}} \cdot \frac{V_2^{(\mathrm{i})} L_0}{S(\mathcal{G})}; \tag{3.29}$$

$$\delta_{\binom{\text{valence}}{\text{compat.}}} = \prod_{i=1}^{r} \delta(n_i - \nu_i); \tag{3.30}$$

$$V_2^{(\mathrm{i})}(i_1, \cdots, i_e; f_1, \cdots, f_e; \mathcal{G}) = \prod_{i=r+1}^{v} \mu(\nu_i); \tag{3.31}$$

$$L_2(x_1, \cdots, x_v; i_1, \cdots, i_e; f_1, \cdots, f_e; \mathcal{G}) = \prod_{l=1}^{e} W_2(x_{\mathrm{in.}(l)}, x_{\mathrm{fin.}(l)}; i_l, f_l); \tag{3.32}$$

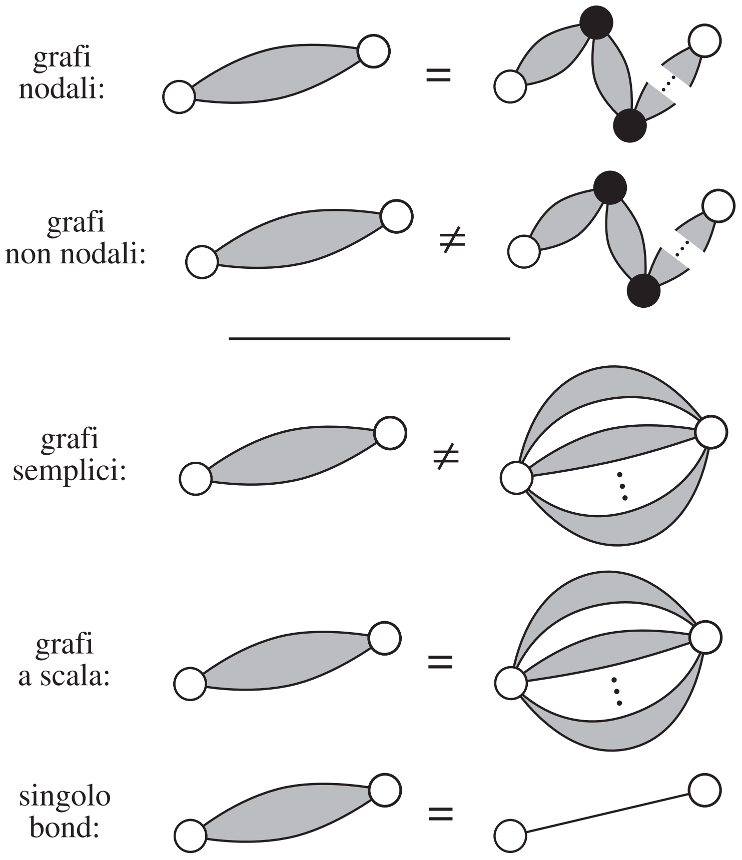
3.5 Restrizione ai grafi elementari.

L'accorto utilizzo di due processi di rinormalizzazione ci ha permesso di restringere grandemente la famiglia di grafi di cui bisogna sommare i contributi per trovare le funzioni a q punti. Con qualche ulteriore accorgimento si può restringere ancora un altro po' questa famiglia.

L'osservazione fondamentale è che i grafi che fungono da "ponte" fra due radici, quelli cioè in $\mathcal{T}^{(2,1)}$, 2-puntati ed 1-irriducibili, si possono vedere come composti da "bolle" davvero elementari, eventualmente disposte in "serie", oppure in "parallelo", e, quando un grafo è costituito da queste bolle disposte in strutture così ordinate, il suo contributo si può ricondurre a quelli delle singole bolle costituenti.

Riesponendo queste idee in maniera più sistematica, scopriamo che i grafi di $\mathcal{T}^{(2,1)}$ possono essere *nodali* (no) o *non nodali* (nn) a seconda che siano riconducibili a bolle in serie o meno. Possono inoltre essere suddivisi in *semplici* (si=simple), *a scala* (la=ladder) od essere un bond singolo (bo), dove i grafi a scala sono quelli composti da bolle in parallelo (la). Questa suddivisione è illustrata in figura (3.5).

Figura 3.5: *Suddivisione dei grafi di $\mathcal{T}^{(2,1)}$ in nodali e non nodali, ed in semplici, a scala e bond singolo.*



Abbiamo quindi

$$\mathcal{T}^{(2,1)} = \mathcal{T}^{(2,1)}_{(\text{no})} \cup \mathcal{T}^{(2,1)}_{(\text{nn})}; \tag{3.33}$$

$$\mathcal{T}^{(2,1)} = \mathcal{T}^{(2,1)}_{(\text{si})} \cup \mathcal{T}^{(2,1)}_{(\text{la})} \cup \mathcal{T}^{(2,1)}_{(\text{bo})}; \tag{3.34}$$

Avremmo a priori sei classi, ma da breve analisi segue

$$\mathcal{T}^{(2,1)}_{(\mathrm{no})} \cap \mathcal{T}^{(2,1)}_{(\mathrm{la})} = \emptyset; \tag{3.35}$$

$$\mathcal{T}^{(2,1)}_{(\mathrm{no})} \cap \mathcal{T}^{(2,1)}_{(\mathrm{bo})} = \emptyset; \tag{3.36}$$

Avremo quindi contributi dalle sole quattro classi rimanenti (di cui una, il bond singolo, banale), che chiameremo rispettivamente: bond, nodale, scala ed elementare; quest'ultima racchiude i grafi che non sono né nodali (bolle in serie), né scala (bolle in parallelo), né il bond singolo, sono quindi le bolle a tutti gli effetti indecomponibili.

Il contributo del bond singolo è triviale. Il contributo dei termini nodali può essere ottenuto ricorsivamente rimuovendo la prima bolla:

$$W_2^{(\mathrm{no})}(x,x';n,n') = \sum_{x'';i,i'} W_2^{(\mathrm{nn})}(x,x'';n,i)\mu(i+i')W_2(x'',x';i',n'); \tag{3.37}$$

Il contributo dei grafi a scala può essere decomposto nel contributo delle singole bolle:

$$W_2^{(\mathrm{la})}(x,x';n,n') = \sum_{s\geq 2} \frac{1}{s!} \sum_{\substack{i_1,\cdots,i_s \\ \sum i_t = n}} \sum_{\substack{f_1,\cdots,f_s \\ \sum f_t = n'}} \prod_{t=1}^{s} W_2^{(\mathrm{si})+(\mathrm{bo})}(x,x';i_t,f_t); \tag{3.38}$$

L'unico contributo non esprimibile in formula chiusa è quello derivante dai grafi elementari, che è la classe più ristretta di grafi a cui è conveniente estendere i nostri meccanismi di rinormalizzazione.

Un ulteriore dettaglio (di scarsa difficoltà concettuale, che quindi non discuteremo a fondo) è quello che prevede di passare da grafi con vertici indicizzati a grafi con vertici non indicizzati, accorgimento che restringe ulteriormente la classe dei grafi e che viene pagato con una semplice modifica del fattore di simmetria.

Capitolo 4

Soluzione di Kac e Ward per problemi su reticoli planari periodici.

In questo capitolo applicheremo il metodo che permise a Kac e Ward [19][1] nel 1952 di riottenere, come caso particolare, l'espressione analitica per l'energia libera nel modello di Ising su reticolo bidimensionale quadrato, già ottenuta nel 1944 da Onsager [18].

La nostra esposizione si discosta da quella tradizionale, poiché abbiamo preferito focalizzare la nostra attenzione sulla individuazione di quegli strumenti che sono estendibili a reticoli più generici, e di quelli che invece fanno appello in maniera critica a caratteristiche metriche o topologiche del piano.

Questo è stato fatto in vista del capitolo 6, in cui riusciremo, utilizzando gli strumenti rimasti validi, ed aggirando con particolari stratagemmi la perdita di altri, ad estrarre una espansione in serie nel parametro di interazione per l'energia libera, e più in generale per le funzioni a q punti, nel caso di reticoli generici.

4.1 Perché questo modello è risolubile?

La soluzione esatta di modelli cooperativi ha suscitato un grande interesse in questi cinquanta anni successivi alla prima soluzione per un problema non banale, Ising in due dimensioni[2]. Oltre alla loro importanza immediata nell'ambito della teoria dei fenomeni critici, tali soluzioni esatte sono state un importante test di verifica per i vari metodi di approssimazione sviluppati

[1]Per una riesposizione particolarmente chiara e prodiga di spunti di riflessione consigliamo [2]. Altrettanto interessante è l'esposizione presente in [1].

[2]Questa introduzione si basa sull'interessante analisi presente nell'articolo di P. W. Kasteleyn [20], nella prefazione al suo metodo di soluzione del problema di tassellazioni compatte con dimeri.

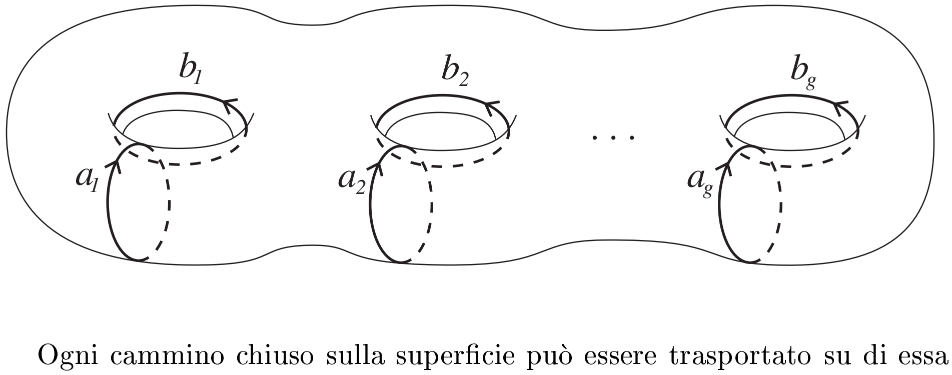
per lo studio di sistemi cooperativi, nonché per la verifica delle ipotesi di scala ed universalità in casi specifici.

Lo studio di una vasta tipologia di problemi ha fatto emergere alcune questioni di fondo. Accanto alla domanda cruciale, su quali aspetti del problema determinino il suo comportamento nell'intorno del punto critico, è sorta una discussione su quali caratteristiche del problema assicurino l'esistenza o la non esistenza di una soluzione esatta.

È emerso che l'applicabilità di tutti i metodi esatti fino ad ora sviluppati dipende crucialmente, non solo dalla dimensionalità del reticolo e del parametro d'ordine, come è noto per la sistematica delle classi di universalità, ma anche dal modo in cui le variabili del sistema interagiscono. Infatti le coppie di siti interagenti descrivono in maniera naturale un grafo, le cui caratteristiche topologiche hanno un ruolo cruciale nel determinare la risolubilità del problema.

Nel seguito del capitolo mostreremo come il metodo di Kac e Ward richieda che il grafo delle interazioni sia planare, ovvero che possa essere disegnato fedelmente su un piano, senza che i suoi bond si intersechino se non nei vertici. In realtà il metodo si può estendere a grafi che si possono disegnare su un toro, a patto di calcolare quattro termini anziché uno soltanto, e più in generale su una superficie di genus g, calcolando 4^g termini. Il genus di una superficie è il numero massimo di curve chiuse non intersecantesi che si possono disegnare sulla superficie senza sconnetterla. Più visivamente, è il numero di buchi che appaiono in essa quando la si distorce fino a farla sembrare una ciambella. Tale numero determina anche delle importanti proprietà algebriche della superficie, quali il primo gruppo di omotopia e di omologia. Senza entrare nell'ambito della geometria algebrica, diremo qui soltanto che, per una generica superficie di genus g, è possibile individuare $2g$ cammini chiusi orientati, che inanellano a coppie i g buchi della superficie (cfr. fig. 4.1).

Figura 4.1: *Superficie di genus g e generatori del gruppo di omotopia.*

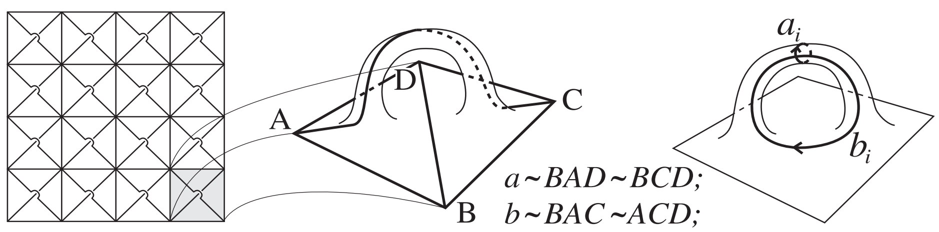


Ogni cammino chiuso sulla superficie può essere trasportato su di essa fino a descrivere dei "giri" lungo questi cammini $a_1, \cdots, a_g, b_1, \cdots, b_g$ che chiameremo *generatori del gruppo di omotopia*, e dei "corridoi" percorsi in un senso, e, dopo un po' di giri, ripercorsi nel senso opposto. Possiamo quindi associare ad ogni cammino una stringa di numeri che elenca, per ogni generatore, il numero di giri che il cammino compie intorno ad esso. Tali numeri sono indipendenti da come abbiamo trasportato il cammino originario a questa forma di "giri e corridoi". Infatti è facile vedere dopo il trasporto che tali numeri per ciascun generatore sono pari al numero di volte che il cammino "scavalca" il suo generatore coniugato in un verso, meno quelle che lo scavalca in verso opposto, e questa proprietà si conserva durante il trasporto.

Per la soluzione di Kac e Ward è sufficiente concentrarsi sulla loro parità, ed associare al cammino la stringa precedente quozientata per $\mathbb{Z}_2$, cioè soltanto con termini zero od uno, a seconda che il numero fosse pari o dispari. Chiameremo $\bar{\alpha} = \{\alpha_1, \cdots, \alpha_g, \alpha'_1, \cdots, \alpha'_g\}$, con $\alpha_i = 0, 1$, tale stringa delle parità associate ai generatori. Le combinazioni possibili sono 2^{2g}, ovvero proprio il numero di termini che bisogna calcolare per ottenere la soluzione esatta col metodo di Kac e Ward per un reticolo di genus g. Infatti ciascun addendo della soluzione è associato ad una di queste classi.

Chiaramente i problemi per cui nessun metodo di soluzione, nè quello di Kac e Ward, nè alcun altro noto, funziona, sono quelli per cui il genus del reticolo con la regolarizzazione di volume è proporzionale al volume ($g \sim N$, dove N è il numero di siti del reticolo). Il reticolo cubico in dimensione tre, con condizioni al bordo toroidali, ad esempio, può essere descritto su una superficie di genus $g = N/4 + 1$. Questo sembrerebbe suggerire che un rapporto di proporzionalità fra genus e volume di un grafo possa giocare il ruolo di una "dimensione effettiva" da aggiungere alla dimensione due di una superficie. L'argomento, però, non è così banale come sembra. Infatti anche per un problema come Ising su reticolo quadrato con interazioni anche su lati e diagonali abbiamo un genus macroscopico (vedi fig. 4.2), eppure il pro-

Figura 4.2: *Struttura topologica del reticolo quadrato con interazioni sulle diagonali.*



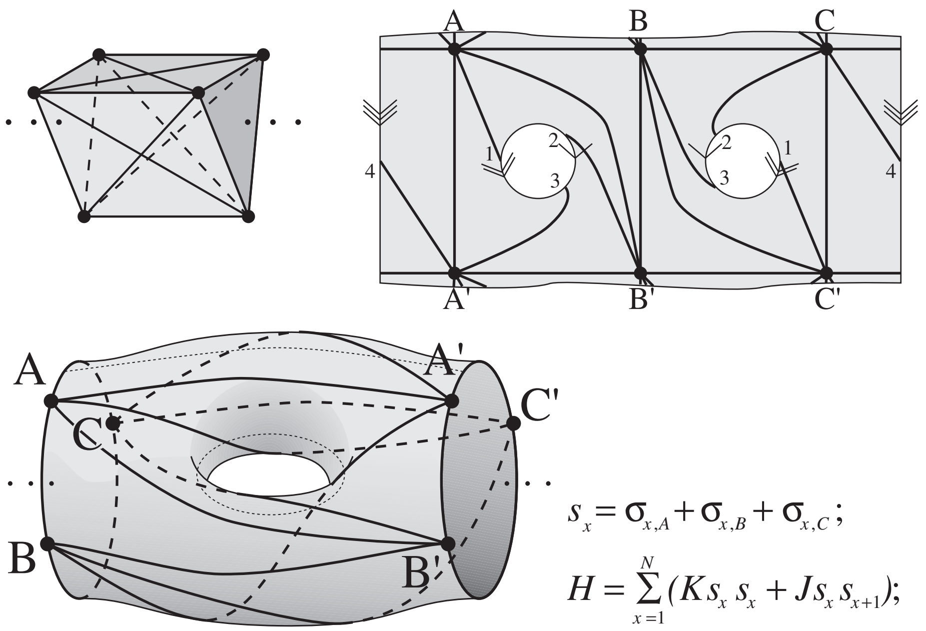
blema rimane bidimensionale. Probabilmente la chiave del ragionamento sta nella disposizione sul reticolo dei generatori del gruppo di omotopia. Infatti essa riesce a discriminare la reale dimensionalità del reticolo. Ad esempio, possiamo definire *dimensionalità di genus* D_g come l'esponente che descrive l'andamento asintotico al crescere di L del numero di classi di omotopia (le stringhe $\bar{\alpha}$) con due soli giri, che hanno almeno un rappresentante (un cammino) di al più L passi.

$$\#\{\bar{\alpha}/\sum \alpha_i = 2; \exists\ \omega \text{ con } |\omega| < L;\ \bar{\alpha}(\omega) = \bar{\alpha}\} \sim L^{D_g}; \tag{4.1}$$

$$1 \ll L \ll 4^N \quad \text{(ad es. } L \sim N\text{) per reticoli finiti;} \tag{4.2}$$

Scopriamo così che i problemi di Ising risolti esattamente hanno $D = 1; D_g = 0$; (Ising unidimensionale, ad esempio), $D = 1; D_g = 1$; (Ising unidimensionale per spin $= \frac{3}{2}$, cfr. fig. 4.3), oppure $D = 2; D_g = 0$ (Ising bidimensionale su reticolo planare).

Figura 4.3: *Catena unidimensionale di spin $S = \frac{3}{2}$ vista come reticolo di Ising su una superficie di genus $g \sim N$.*



4.2 Introduzione del modello.

Passiamo ora alla soluzione di Kac e Ward. Cominciamo col definire il modello in questione.

Consideriamo un reticolo bidimensionale planare periodico. Su ogni sito i del reticolo sia posta una variabile di spin $\sigma_i = \pm 1$, e su ogni bond $l = \langle ij \rangle \equiv \langle ji \rangle$ sia assegnata una energia J_{ij}. Una configurazione del nostro sistema sarà quindi una assegnazione degli spin su ogni sito $\sigma = \{\sigma_i\}$. Vogliamo calcolare l'energia libera di questo sistema nel caso di campo nullo, ovvero per l'hamiltoniana

$$H[\sigma] = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}\, \sigma_i \sigma_j \tag{4.3}$$

Ricordiamo che l'energia libera è sostanzialmente il logaritmo della funzione di partizione, ovvero della somma sulle configurazioni del sistema, σ, del peso di Gibbs ad esse associato

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z; \qquad Z = \sum_{\sigma} \exp(-\beta H[\sigma]). \tag{4.4}$$

Ricordiamo inoltre lo sviluppo di alte temperature:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma} e^{-\beta H[\sigma]} = \sum_{\sigma} \prod_{\langle ij \rangle} (\cosh \beta J_{ij} + \sigma_i \sigma_j\, \sinh \beta J_{ij}) \\ &= \Big(2^N \prod_{\langle ij \rangle} \cosh \beta J_{ij} \Big) \cdot \sum_{\mathcal{G}_{\mathrm{even}}} \prod_{\langle ij \rangle} (\tanh \beta J_{ij})^{n_{ij}} \end{aligned} \tag{4.5}$$

Dove gli $\mathcal{G}_{\mathrm{even}}$ sono i sottografi del reticolo a coordinazione pari su ogni bond, e n_{ij} è il numero di occupazione del bond che unisce i siti i e j, che può essere soltanto zero o uno.

Nel seguito alleggeriremo la notazione evitando di trascrivere il fattore noto davanti alla sommatoria e scrivendo in forma più compatta il peso di ciascuna configurazione:

$$Z = (Z_{\mathrm{reg.}}) \cdot \sum_{\mathcal{G}_{\mathrm{even}}} \prod_{\langle ij \rangle} \tau_{ij}^{n_{ij}} \tag{4.6}$$

Ricordiamo che questa procedura non fa uso in alcun modo né della struttura regolare del reticolo, né della sua dimensionalità.

Notiamo per inciso che uno sviluppo di basse temperature conduce, in due dimensioni, ad una espansione in termini di grafi simile a quello della formula (4.6), dove ogni grafo è una porzione connessa del bordo di un dominio della configurazione, ma in tal caso il passaggio a dimensione generica porta ad una espansione in bordi di domini contenuti in volumi D-dimensionali, quindi superfici $(D-1)$-dimensionali, ben più difficili da manipolare. Menzioniamo in proposito l'analisi di questo approccio per il problema di Ising-3D svolta da C. Itzykson [25, 26].

4.3 Decorazione del reticolo.

Al fine di semplificare l'esposizione, notiamo che, nel calcolo della funzione di partizione, è sempre possibile assumere che il reticolo sia a coordinazione tre. Infatti, i siti con coordinazione minore sono rimossi in maniera elementare, e quelli con coordinazione maggiore sono riportabili a "grappoli" di siti a coordinazione tre, a patto di eseguire alcuni limiti non difficili. Questo genere di manipolazione algebrica è solitamente chiamato *decorazione*.

Mostriamo di seguito i passaggi algebrici che dimostrano l'identità fra il reticolo originario e quello decorato nei vari casi:

coordinazione 1:

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{\sigma_a} \sum_{\sigma_{\rm resto}} e^{-\beta J \sigma_a \sigma_b} e^{-\beta H[\sigma_{\rm resto}]} = 2\cosh\beta J \sum_{\sigma_{\rm resto}} e^{-\beta H[\sigma_{\rm resto}]} \\
&= 2\cosh\beta J \; Z'
\end{aligned}
\tag{4.7}
$$

coordinazione 2:

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{\sigma_b} \sum_{\sigma_{\rm resto}} e^{-\beta(J_1\sigma_a + J_2\sigma_c)\sigma_b} \, e^{-\beta H[\sigma_{\rm resto}]} \\
&= \sum_{\sigma_b} \left[\sum_{\substack{\sigma_{\rm resto} \\ \sigma_a=\sigma_c}} e^{-\beta(J_1+J_2)\sigma_a\sigma_b} e^{-\beta H[\sigma_{\rm resto}]} + \sum_{\substack{\sigma_{\rm resto} \\ \sigma_a=-\sigma_c}} e^{-\beta(J_1-J_2)\sigma_a\sigma_b} e^{-\beta H[\sigma_{\rm resto}]} \right] \\
&= 2\cosh\beta(J_1+J_2) \sum_{\substack{\sigma_{\rm resto} \\ \sigma_a=\sigma_c}} e^{-\beta H[\sigma_{\rm resto}]} + 2\cosh\beta(J_1-J_2) \sum_{\substack{\sigma_{\rm resto} \\ \sigma_a=-\sigma_c}} e^{-\beta H[\sigma_{\rm resto}]} \\
&= 2\sqrt{\cosh\beta(J_1+J_2)\;\cosh\beta(J_1-J_2)} \sum_{\sigma_{\rm resto}} e^{-\beta(H[\sigma_{\rm resto}] + J\sigma_a\sigma_c)};
\end{aligned}
\tag{4.8}
$$

con

$$
e^{2\beta J} = \frac{\cosh\beta(J_1+J_2)}{\cosh\beta(J_1-J_2)} \tag{4.9}
$$

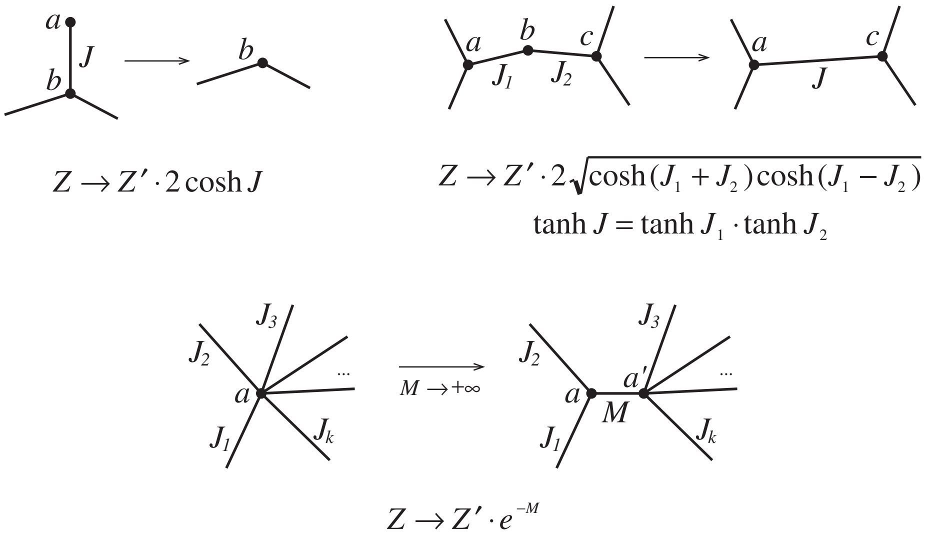
coordinazione $k > 3$**:**

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{\sigma_a} \sum_{\sigma_{\text{resto}}} e^{-\beta(J_1\sigma_1+\cdots+J_k\sigma_k)\sigma_a}\, e^{-\beta H[\sigma_{\text{resto}}]} \\
&= \sum_{\substack{\sigma_a \\ \sigma_{a'}=\sigma_a}} \sum_{\sigma_{\text{resto}}} e^{-\beta((J_1\sigma_1+J_2\sigma_2)\sigma_a+(J_3\sigma_3+\cdots+J_k\sigma_k)\sigma_{a'})}\, e^{-\beta H[\sigma_{\text{resto}}]} \\
&= \lim_{M\to-\infty} e^{\beta M} \sum_{\sigma_a,\sigma_{a'}} \sum_{\sigma_{\text{resto}}} e^{-\beta((J_1\sigma_1+J_2\sigma_2)\sigma_a+(J_3\sigma_3+\cdots+J_k\sigma_k)\sigma_{a'})} \\
&\qquad \cdot\, e^{-\beta M\sigma_a\sigma_{a'}}\, e^{-\beta H[\sigma_{\text{resto}}]} \\
&= \lim_{M\to-\infty} \frac{1}{2\cosh(-\beta M)} \sum_{\sigma_a,\sigma_{a'}} \sum_{\sigma_{\text{resto}}} e^{-\beta((J_1\sigma_1+J_2\sigma_2)\sigma_a+(J_3\sigma_3+\cdots+J_k\sigma_k)\sigma_{a'})} \\
&\qquad \cdot\, e^{-\beta M\sigma_a\sigma_{a'}}\, e^{-\beta H[\sigma_{\text{resto}}]}
\end{aligned}
\tag{4.10}
$$

in seguito a questo procedimento il sito a ha coordinazione 3 ed il sito a' coordinazione $k-1$. Per k finito possiamo iterare il procedimento, fino ad avere una catena di $k-2$ siti congiunti da legami di energia tendente ad infinito, al posto del sito iniziale.

Tali tediosi passaggi di algebra sono illustrati in maniera più efficace in figura 4.4.

Figura 4.4: *Meccanismo di decorazione di un reticolo a coordinazione diversa da tre.*



La ragione per cui abbiamo deciso di sostituire il nostro reticolo iniziale con il suo "decorato" di coordinazione 3 è che per tale reticolo la formula per lo sviluppo di alte temperature assume un aspetto molto suggestivo. Ricordiamo che nella (4.6) $\{\mathcal{G}_{\text{even}}\}$ è l'insieme dei sottografi propri del reticolo[3] a coordinazione pari su ogni sito. Tale insieme, però, per un reticolo a coordinazione 3, coincide con l'insieme delle configurazioni di cammini chiusi non orientati self-avoiding nei bond, quindi lo sviluppo di alte temperature ci ha permesso di mappare il problema di Ising in un problema di bSAW (cfr. l'appendice A), con matrice di transfer associata al reticolo

$$M_{ij} = \tau_{ij} = \tanh \beta J_{ij}; \tag{4.11}$$

più una parte regolare da aggiungere a tutte le quantità fisiche, non interessante ai fini dello studio del comportamento critico del sistema.

4.4 Calcolo della serie per l'energia libera.

Abbiamo mostrato che è possibile reinterpretare il problema di Ising come un problema bSAW, con funzione di partizione

$$Z = \sum_{\Omega_{\text{bSAW}}} \prod_{\langle ij \rangle} \tau_{ij}^{n_{ij}}; \tag{4.12}$$

Alla sezione 6.6 dimostreremo un teorema generale che garantisce la sviluppabilità della serie dell'energia libera in termini di cammini non backtracking ω_{nbt} sul reticolo, dove ogni cammino interviene con un peso dato dal prodotto di una parte "termodinamica" (del tipo $\tau_{ij}^{n_{ij}}$) e di una parte "topologica", che non dipende dai dettagli del reticolo o del cammino, ma soltanto da proprietà, topologiche appunto, come il numero e la disposizione delle autointersezioni del cammino. La natura di questo fattore verrà chiarita nel corso del procedimento.

In questa sezione specializziamo tale risultato al caso di reticoli planari, contesto nel quale si riescono a trovare in forma chiusa i pesi topologici citati sopra. Anzi, si troverà un risultato ancora più forte: per reticoli periodici, tale peso appartiene alla classe di pesi il cui calcolo è implementabile attraverso la tecnica standard di somma per i random walks, ovvero la costruzione attraverso matrice di transfer, illustrata all'appendice A.

La proprietà combinatoria descritta sopra si può esprimere nel seguente teorema:

Teorema 4.4.1. *Esiste una assegnazione di pesi topologici per l'insieme dei cammini non backtracking su reticolo, $f(\omega_{\text{nbt}}) = \pm 1$, tale per cui l'energia libera si scrive come una serie su questi cammini del prodotto del peso topologico ad essi associato per la misura corrispondente. Ovvero vale*

$$\exists f : \{\omega_{\text{nbt}}\} \to \{-1, +1\} \quad / \quad Z = \exp \sum_{\omega_{\text{nbt}}} \prod \tau_{ij}^{n_{ij}(\omega)} \, f(\omega). \tag{4.13}$$

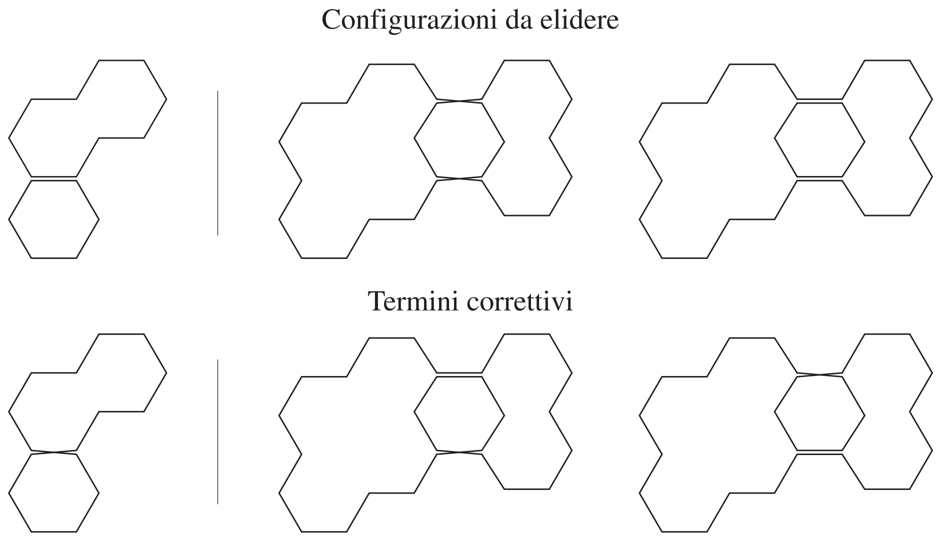
[3]Cioè ogni bond del reticolo appare come bond del sottografo con molteplicità o zero o uno.

Prima di mostrare la veridicità di questa affermazione, vogliamo fornire delle ragioni intuitive di plausibilità. L'esistenza di un simile risultato è suggerita dal limite di temperature molto alte. In tale situazione la presenza dei cammini è depressa, quindi il sistema è un gas di cammini, self-avoiding sui bond, molto rarefatto. Per questa ragione lo possiamo approssimare con la sua versione "perfetta", ovvero un ensemble di cammini, ciascuno self-avoiding, ma dove non sia richiesta tale condizione anche fra cammino e cammino. In questa prima approssimazione la funzione di partizione ha una forma esponenziale a vista.

Cosa accade quando cerchiamo di introdurre le prime correzioni? L'errore è dovuto al fatto che abbiamo contato delle configurazioni in cui i cammini si sovrappongono, violando la condizione di essere bSAW.

Fortunatamente è possibile elidere il peso di tali configurazioni con uno stratagemma: due cammini che si sovrappongono danno origine ad un set di numeri di occupazione sul reticolo che può essere interpretato anche come un unico cammino non self-avoiding, ma ancora non backtracking, a patto di effettuare i giusti "scambi ferroviari" sulle autointersezioni. Così, aggiungendo all'espressione per l'energia libera anche tali cammini non self-avoiding, con peso cambiato di segno, si riescono a cancellare questi primi termini indesiderati (cfr. fig. 6.3).

Figura 4.5: *Correzioni agli ordini più bassi rispetto all'approssimazione di gas perfetto di* ω_{SAP}.



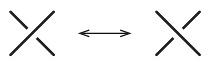
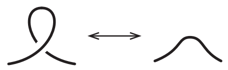
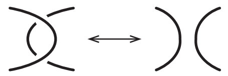
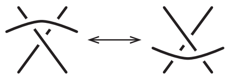
Proof. La proprietà cruciale dei nostri reticoli bidimensionali planari è che il peso da assegnare ad ogni cammino è strettamente legato ad un noto invariante topologico. Infatti si vede (cfr. la sezione 6.7, ma possiamo porlo a questo punto come un *ansatz*) che tale peso, solo per reticoli planari, è $(-1)^{\#(\text{autointersezioni})}$, ed inoltre che, solo per reticoli planari, tale valore può essere legato ad un noto invariante topologico per i cammini chiusi, $\mathcal{W}_\omega$, ovvero il cosiddetto *winding number* del cammino ω, definito come il numero di rotazioni che compie un vettore unitario tangente al cammino, quando viene trasportato lungo lo stesso in un giro completo. Questo numero è un intero, e l'ambiguità di segno nel caso di cammini non orientati è ininfluente sul calcolo del nostro peso.

Il legame fra numero di intersezioni e winding number è dato dalla formula

$$(-1)^{\#(\text{autointersezioni})_\omega} = (-1)^{\mathcal{W}_\omega + 1} \tag{4.14}$$

Una dimostrazione di questo fatto si ha verificando tale proprietà su una estensione delle mosse di Rademaster per i nodi [4]. Infatti per mezzo di queste mosse è possibile costruire ciascun cammino a partire dal loop semplice (l'anello senza intersezioni), per il quale la formula è chiaramente vera.

Figura 4.6: *Verifica sulle mosse di Rademaster della relazione (4.14).*

Mossa	*Trasformazione*	Δn^o *di intersezioni*	$\Delta\mathcal{W}$
Ω_{extra}		0	0
Ω_1		-1	±1
Ω_2		-2	0
Ω_3		0	0

Inoltre ogni insieme di cammini che presenti almeno una intersezione (autointersezione di un cammino o intersezione reciproca fra due) può essere associato in una maniera canonica (cfr. ad esempio la sezione 6.6) all'insieme di cammini in cui le quattro terminazioni della intersezione vengono scambiate. Queste quattro terminazioni sottendono due archi di cammino, chiusi sull'intersezione. Per via della planarità del grafo, tali archi di cammino avranno un numero pari di intersezioni reciproche, così che

[4]Per una semplice introduzione alla teoria dei nodi ed agli invarianti ad essa associati, in particolar modo per una dimostrazione della completezza delle relazioni di Rademaster, cfr. [10].

lo scambio delle terminazioni avrà sempre l'effetto di cambiare la parità del numero complessivo di autointersezioni per i cammini che compongono l'insieme. Seguendo il nostro *ansatz*, quindi, tale associazione canonica ha l'effetto di annullare, sulle coppie associate in maniera canonica, il peso di configurazioni di cammini che non fossero self-avoiding. Non restano che le configurazioni self-avoiding, che la nostra formula conta esattamente (è una facile verifica). □

Per ottenere il risultato del teorema 4.4.1 è stata utilizzata soltanto la planarità del grafo. Questo non è un caso. Come abbiamo visto alla sezione 4.1, il ruolo del genus del grafo è determinante ai fini della risolubilità del sistema di spin da esso descritto[5].

Una volta scoperto il peso da assegnare a ciascun cammino chiuso, si implementa il calcolo della serie con il metodo tradizionale per i random walks, come descritto all'appendice A. Si ottiene così

$$-\beta(F - F_{\text{reg.}}) = -\sum_{L\geq 1} \frac{1}{2L} \operatorname{tr} \widehat{M}^L = \frac{1}{2} \operatorname{tr} \ln(I - \widehat{M}) = \frac{1}{2} \ln \det(I - \widehat{M}) \tag{4.15}$$

Essendo il reticolo periodico, l'operatore $\widehat{M}$ si diagonalizza facilmente passando in trasformata di Fourier. Inoltre, facendo uso del fatto che tale reticolo può essere immerso nel piano bidimensionale *a curvatura nulla* preservando la propria periodicità, possiamo calcolare il winding number di ciascun cammino riportando il numero di giri fatto ai singoli contributi derivanti dalla deviazione che il vettore tangente subisce ad ogni passo del cammino. I termini che danno origine a questo primo fattore del peso possono quindi essere inglobati in $\widehat{M}$. Inoltre si usa l'accorgimento di esprimere $\widehat{M}$ nella base data dai bond orientati di una cella del reticolo, e non in quella data dai punti, in quanto nella base dei bond è facile implementare anche la condizione di cammini non backtracking. In tal modo si giunge al risultato

$$\frac{F(\beta)}{N} = -\frac{1}{2\beta} \int_{[0,2\pi]\times[0,2\pi]} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \ln \det(I - M^{(nbt)}(p)) \tag{4.16}$$

dove l'ampiezza per compiere un passo da un dato bond a un altro, M_{ij}, comprende un fattore termodinamico (del tipo $\tanh \beta J$), un eventuale fattore dovuto alla traslazione, qualora il passo porti in una cella adiacente (del tipo $e^{ip_{\vec{\eta}}}$) ed un fattore dovuto alla deviazione del vettore tangente (del tipo $e^{i\frac{\theta}{2}}$). Ad esempio, per il problema di Ising su reticolo quadrato, con energia dei legami omogenea e pari a J, adeguatamente decorato con il procedimento descritto alla sezione 4.3, si ha

[5]Ricordiamo che il genus di un grafo è il minimo fra i genus delle varie superfici orientate senza bordo su cui il grafo può essere descritto fedelmente.

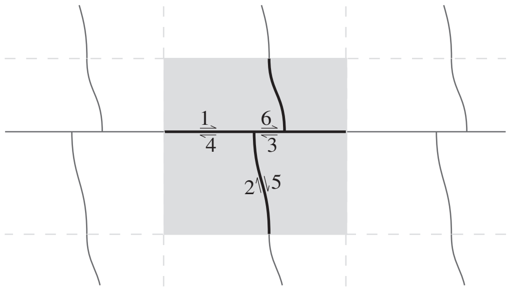
$$M^{(nbt)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \tau\alpha^{-1} & \sqrt{\tau} \\ 0 & 0 & 0 & \tau\alpha & 0 & \sqrt{\tau}\alpha^{-1} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{\tau} & \sqrt{\tau}\alpha & 0 \\ 0 & \tau\alpha^{-1}u^{-1}v & \sqrt{\tau}u^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ \tau\alpha u v^{-1} & 0 & \sqrt{\tau}\alpha^{-1}v^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\tau}u & \sqrt{\tau}\alpha v & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \tag{4.17}$$

con

$$\tau = \tanh(\beta J); \quad \alpha = e^{i\frac{\pi}{4}}; \quad u = e^{ip_x}; \quad v = e^{ip_y}; \tag{4.18}$$

$$\frac{F}{N} = \frac{F_{\text{reg.}}}{N} - \frac{1}{2\beta}\int_{[0,2\pi]\times[0,2\pi]} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \ln\big((1+\tau^2)^2 - 2\tau(1-\tau^2)(\cos p_x + \cos p_y)\big) \tag{4.19}$$

Figura 4.7: *Decorazione della cella elementare nel caso di reticolo quadrato.*



La densità di energia libera è singolare per $\tau = \sqrt{2} - 1$, ed il calore specifico ha una singolarità logaritmica.

Una analisi più approfondita permette di calcolare tutti gli esponenti critici del sistema [5], che riassumiamo di seguito:

$$\alpha = 0; \qquad \beta = \frac{1}{8}; \tag{4.20}$$

$$\gamma = \frac{7}{4}; \qquad \delta = 15; \tag{4.21}$$

$$\eta = \frac{1}{4}; \qquad \nu = 1; \tag{4.22}$$

Capitolo 5

Modelli legati alla soluzione di Kac e Ward.

Il metodo di Kac e Ward per la risoluzione del problema di Ising su reticolo bidimensionale planare, esposto al capitolo precedente, a dispetto dell'apparente accidentalità di alcuni risultati (cancellazioni esatte che a prima vista potrebbero sembrare fortunose ed irripetibili), in realtà nasconde dei meccanismi profondi e generali, e presenta numerosi spunti di sviluppo che ci accompagneranno in tutto il seguito di questo lavoro.

In questo capitolo analizzeremo alcune derivazioni non banali di esso, la prima dovuta a P. W. Kasteleyn [20], la seconda originale, che tendono a mostrare le potenzialità di questo metodo, e, per quanto ci è possibile, di indagarne più a fondo i meccanismi.

5.1 I problemi di tassellazione compatta con dimeri.

La statistica di dimeri su reticolo presenta caratteristiche molto simili a quelle di sistemi di spin. Il più delle volte è possibile mettere in relazione attraverso semplici manipolazioni algebriche problemi apparentemente molto diversi appartenenti alle due classi di sistemi. Al di là dell'apparente trivialità di tali riformulazioni, è frequente ricevere degli spunti interessanti da un approccio alternativo ad un problema. Una particolare classe di sistemi di dimeri, quella a cui appartengono i problemi di tassellazione compatta (close-packed dimer coverings, o CpDC), è stata dapprima messa in relazione con i sistemi di Ising, quindi risolta in maniera indipendente da P. W. Kasteleyn [20], con un metodo che ad una attenta analisi risulta parallelo a quello di Kac e Ward.

Un dimero è una coppia di siti adiacenti: a tutti gli effetti lo possiamo pensare visivamente come un bond "marcato". Ci restringeremo immediatamente al caso in cui le configurazioni di dimeri ammesse sono quelle che tassellano tutto il reticolo senza overlap e senza lacune (tassellazione compatta). In termini più matematici, tali configurazioni sono i sottografi del grafo iniziale per cui ogni vertice del grafo è un vertice del sottografo a coordinazione uno. L'energia di una data configurazione è pari alla somma su tutti i bond appartenenti al sottografo dell'energia associata al bond, ovvero

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} \varepsilon_{ij} \cdot n_{ij}; \tag{5.1}$$

$$Z = \sum_{\text{config. dimeri } \Gamma} e^{-\beta H[\Gamma]} = \sum_{\Gamma} \prod_{\langle ij \rangle} e^{-\beta \varepsilon_{ij} \cdot n_{ij}} = \sum_{\Gamma} \prod_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{n_{ij}}; \tag{5.2}$$

Sarebbe facile vedere che ciascun problema di tassellazione compatta con dimeri può essere mappato in un problema di Ising su un reticolo opportunamente decorato, e viceversa. È però ancor più facile scoprire che ambo i problemi sono riconducibili a problemi bSAW. Abbiamo già discusso questa derivazione per il modello di Ising, ottenuta per mezzo dello sviluppo di alte temperature. Nel caso del problema delle configurazioni compatte di dimeri (close-packed dimer coverings, o CpDC) la corrispondenza è visivamente più immediata. Si scelga una configurazione di riferimento[1]. Per ciascuna configurazione dell'ensemble consideriamo il sottografo costituito dai bond che hanno numero di occupazione diverso nelle due configurazioni. Su ogni vertice insiste un solo dimero: se il bond occupato è lo stesso nelle due configurazioni, allora dal punto non passa nessun cammino, se sono due bond diversi, allora passa un cammino da un bond all'altro. Abbiamo così insiemi di cammini bSAW, con l'imposizione di fare un passo ogni due su un bond occupato nella configurazione di riferimento. Un passo su un bond occupato nella configurazione di riferimento ha un costo in termini di fattore di Gibbs pari a $e^{-\beta\varepsilon_{ij}}$, uno su un bond occupato nella configurazione in questione ha costo $e^{+\beta\varepsilon_{ij}}$. Se si aumentano le energie di un valore M elevato, nel limite $M \to +\infty$ non è più necessario introdurre dall'esterno l'imposizione di fare un passo ogni due su un bond occupato nella configurazione di riferimento. Rimane quindi un problema di bSAW.

Esiste però un approccio più diretto ed istruttivo al problema delle CpDC, sviluppato da P. W. Kasteleyn [20], che risolve il modello senza fare ricorso esplicito al metodo di Kac e Ward. Nel seguito della sezione analizzeremo questa soluzione.

Ricordiamo la definizione dello *Pfaffiano*[2] di una matrice antisimmetrica A di dimensione pari ($= 2m$):

$$\operatorname{Pf} A = \sum_{\substack{\sigma \in \mathfrak{S}_{2m} \\ \sigma_{2i} < \sigma_{2i+1}}} \epsilon(\sigma) \prod_{i=1}^{m} A_{\sigma_{2i}\sigma_{2i+1}} = \frac{1}{2^m m!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{2m}} \epsilon(\sigma) \prod_{i=1}^{m} A_{\sigma_{2i}\sigma_{2i+1}}; \tag{5.3}$$

[1] Ai fini della assoluta convergenza di un eventuale sviluppo si consiglia una configurazione di energie minima, ma il problema si può mappare per riferimenti generici.

[2] Cfr. appendice A.

di cui rimarchiamo l'utile proprietà

$$(\mathrm{Pf}\, A)^2 = \det A \tag{5.4}$$

L'idea di Kasteleyn è che è possibile trovare una matrice $N \times N$, con entrate in corrispondenza con i siti del reticolo, per cui lo Pfaffiano sia pari alla funzione di partizione del sistema. Egli in particolar modo suddivide la dimostrazione del suo metodo in tre passi

1. esiste una corrispondenza uno a uno fra i termini non nulli dello Pfaffiano e le configurazioni di dimeri ammesse;

2. tali addendi in corrispondenza (dello Pfaffiano e della funzione di partizione) sono uguali, almeno in valore assoluto;

3. tutti gli addendi dello Pfaffiano hanno lo stesso segno (così come quelli della funzione di partizione).

La prima e la seconda condizione sono automaticamente soddisfatte se poniamo

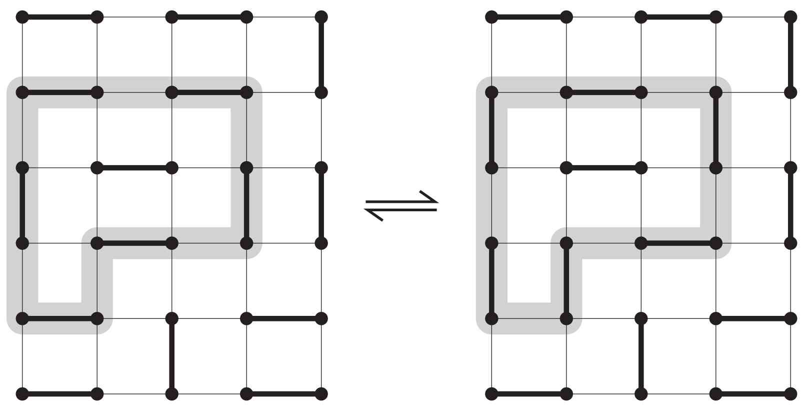
$$A_{ij} = -A_{ji} = \pm J_{ij}; \tag{5.5}$$

come segue da una facile verifica, dapprima sui termini nulli, quindi sui termini non nulli. La terza condizione è più difficile da soddisfare. Dobbiamo scegliere un segno da attribuire ad ogni termine della matrice corrispondente ad un bond, in modo tale che nello sviluppo dello Pfaffiano i termini non nulli siano tutti concordi. È facile vedere che, a partire da una qualunque configurazione di riferimento, si può raggiungere qualunque altra per mezzo di un certo numero di mosse, corrispondenti a far scorrere di un passo una singola catena chiusa di dimeri (cfr. fig. 5.1). Le catene da fare scorrere sono facilmente identificate dall'insieme dei bond che hanno numeri di occupazione differenti nelle due configurazioni. Siccome l'essere dello stesso segno è una chiara relazione di equivalenza, ci basterà considerare una singola catena. A seconda se il numero di dimeri spostato è pari o dispari, le due permutazioni corrispondenti ai due addendi andranno l'una nell'altra applicando un numero rispettivamente dispari o pari di trasposizioni, e quindi cambiando tutti i segni. Ad esempio, scegliendo arbitrariamente gli indici dei siti, ed assumendo, per fissare le idee, come verso di riferimento quello degli indici crescenti, si ha:

$$\begin{aligned}
&(1,2),(3,4),(5,6),\cdots,(2k-1,2k)\\
\to& -1\cdot(3,2),(1,4),(5,6),\cdots,(2k-1,2k)\\
\to&(-1)^2\cdot(3,2),(5,4),(1,6),\cdots,(2k-1,2k)\\
\to&\cdots\to(-1)^{k-1}\cdot(3,2),(5,4),(7,6),\cdots,(1,2k)\\
\to&(-1)^{2k-1}\cdot(2,3),(4,5),(6,7),\cdots,(2k,1)
\end{aligned}$$

Si ottiene così che, indipendentemente dal numero di dimeri spostati, una mossa elementare produce un segno relativo -1 a livello della segnatura. I segni attribuiti ai bond interessati dovranno essere determinati di conseguenza. È una utile notazione indicare con una freccia sul bond del reticolo la scelta del segno per la coppia di elementi di A: se $A_{ij} = -A_{ji} = J_{ij}$ allora porremo una freccia sul sito $\langle ij \rangle$ in direzione di j. La condizione appena trovata si traduce nel richiedere che in ogni cammino chiuso (corrispondente ad una mossa elementare) i numeri delle frecce orientate in senso orario ed antiorario siano entrambi dispari. Per un reticolo inscritto su una superficie di genus g questa condizione è automaticamente soddisfatta per tutte le catene se lo è per tutti i cammini chiusi "minimi" (ovvero quelli che non circondano nessun sito, ed al più un bond) contraibili e di lunghezza pari, ed un cammino di lunghezza pari per ciascun generatore del gruppo di omotopia. In particolar modo, se il grafo è planare, basterà considerare i soli cammini "minimi". Nel caso in cui il reticolo è costituito di soli poligoni con un numero pari di lati (ad esempio un reticolo quadrato, od esagonale) è immediato dimostrare che è possibile fare una buona assegnazione dei pesi sui cammini minimi (questa proprietà è equivalente all'esistenza di un sottografo a coordinazione dispari su tutti i vertici per il reticolo duale). I cammini corrispondenti ai generatori del gruppo di omotopia, invece, creano maggiori problemi. Quando essi sono in numero finito, è facile generalizzare il procedimento: semplicemente si vieta la mossa elementare corrispondente al cammino di segno errato, perdendo così l'ergodicità delle mosse elementari (l'insieme delle configurazioni si suddivide nelle classi di equivalenza delle configurazioni raggiungibili con mosse locali, labellate dalle stringhe di numeri di occupazione $\bar{\alpha}$), e bisogna ripetere il calcolo 4^g volte, scegliendo una configurazione di riferimento per ogni classe di equivalenza.

Figura 5.1: *Mossa elementare che permette di costruire una qualunque configurazione a partire da una data.*



Tornando al caso di reticoli planari, una volta determinata la scelta dei segni, non resta che calcolare lo Pfaffiano della matrice A, o meglio la radice quadrata del suo determinante. Illustriamo tale procedimento per un esempio specifico, nel caso di reticolo esagonale.

Come si vede dalla figura 5.2, una cella elementare è composta da due vertici, uno con sole frecce entranti, uno con frecce uscenti. Chiamiamo rispettivamente x e x' tali vertici, con $x = m\hat{x} + n\hat{y}$ e $x' = m\hat{x} + n\hat{y} + x'_0$. Operando il cambiamento di base unitario (a meno di un fattore $(2\pi)^{-1/2}$)

$$A_{k,k'} = \sum_{x,x'} A_{x,x'} e^{i(k\cdot x + k'\cdot x')} \tag{5.6}$$

la matrice rimane diagonale a blocchi 2×2, uno per ogni vettore d'onda ammesso, del tipo

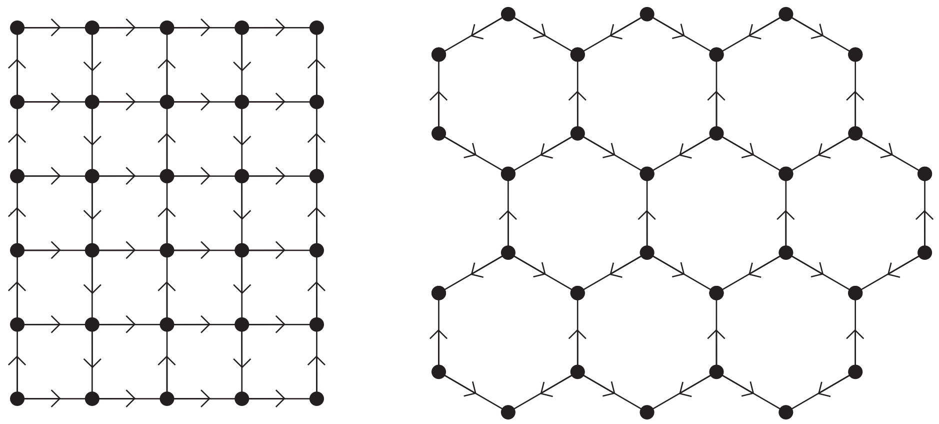
$$A_{(k)} = \begin{pmatrix} 0 & J_1 + e^{ih_x} J_2 + e^{ih_y} J_3 \\ -J_1 - e^{-ih_x} J_2 - e^{-ih_y} J_3 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.7}$$

con J_1, J_2, J_3 pari ai fattori di Gibbs per dimeri nelle tre direzioni. Il calcolo del determinante porta a

$$Z = \sqrt{\prod_k \det A_{(k)}}; \tag{5.8}$$

$$F = -\frac{1}{2\beta} \sum_k \ln\det A_{(k)}; \tag{5.9}$$

Figura 5.2: *Orientazione per la scelta dei segni nel caso di reticoli quadrato ed esagonale.*



che nel limite termodinamico diviene

$$\frac{F}{N} \to -\frac{1}{2\beta} \int_{\substack{[0,2\pi] \\ \times[0,2\pi]}} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \ln(J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 + J_1 J_2 \cos k_x + J_1 J_3 \cos k_y + J_2 J_3 \cos(k_x + k_y)); \quad (5.10)$$

Questo sistema presenta una transizione ordine-disordine quando uno dei tre fattori di Gibbs diventa più grande degli altri due. Quando è più grande, il sistema si trova nella fase di dimeri tutti allineati nella direzione ad esso corrispondente, ed una eccitazione elementare costa energia infinita nel limite di volume infinito. Quando invece è più piccolo prevale la fase disordinata, con presenza di dimeri orientati in ogni direzione.

5.2 Polimeri ramificati.

Alla sezione 4.1, ispirandoci all'articolo di P.W. Kasteleyn [20], abbiamo osservato come per una certa classe di problemi, fra cui Ising e ricoprimenti compatti con dimeri, si sia giunti ad una soluzione esatta soltanto per i reticoli di genus finito. Invece, per altre classi di problemi, quale random walks liberi e polimeri ramificati [21], si è in possesso di una soluzione esatta nel caso di reticoli generici. Nel suo articolo Kasteleyn auspica la scoperta di un criterio per sapere se una certa classe di problemi è risolubile su reticoli di genus finito o generico.

In questa sezione cercheremo di aprire un piccolo spiraglio in questa direzione, mostrando come uno dei problemi risolubili in generale, una particolare versione di polimeri ramificati, si presta bene ad una riformulazione in termini di random walks un po' speciali. Scopriremo che la risolubilità di questo problema è dovuta al fatto che tali cammini costituiscono in sostanza solo uno dei 4^g termini della serie di Kac e Ward per reticoli di genus g, quello corrispondente a cammini omotopi al punto, ovvero con stringa $\bar{\alpha}$ composta da soli zeri, e quindi non esplora tutta la complessità dovuta ad un grosso gruppo di omotopia.

Non è facile presentare fin da principio una hamiltoniana credibile per il problema che è realmente risolubile, per cui proveremo a risolverlo tentativamente, partendo da un modello intuitivo, e raffinando la scelta del nostro ensemble a mano a mano che il procedimento viene chiarito.

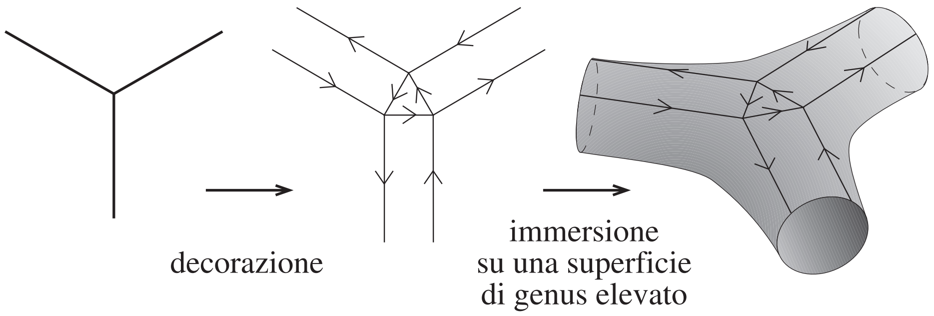
Consideriamo un reticolo periodico di coordinazione tre, in dimensione D. Un polimero ramificato è un sottografo del reticolo che non possiede circuiti chiusi. Il nostro ensemble sarà quello degli insiemi di polimeri ramificati sul reticolo, che non abbiano sovrapposizioni, con energia proporzionale al numero di monomeri e di legami che compongono i polimeri, (ovvero al numero di bond e di siti dei sottoreticoli). In formule, assegnando un numero di occupazione $n_i = 0, 1$ a ciascun sito, ed un numero di occupazione $n_{ij} = 0, 1$

a ciascun bond, a seconda che essi facciano parte o meno di un polimero, e chiamando $\mathcal{G}_{\rm tree}$ (sottografi ad albero) le configurazioni ammesse, avremo

$$H[\mathcal{G}_{\rm tree}] = \sum_i K_i n_i + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} n_{ij}; \tag{5.11}$$

$$Z = \sum_{\mathcal{G}_{\rm tree}} e^{-\beta H[\mathcal{G}_{\rm tree}]}; \tag{5.12}$$

Figura 5.3: *Corrispondenza fra il problema dei polimeri ramificati e quello di cammini self-avoiding omotopi al punto: decorazione del reticolo.*



È possibile decorare il reticolo in modo da avere un reticolo orientato, inscrivibile su una superficie di genus elevato ($\sim N$, dove N è il numero di siti del reticolo), facendo corrispondere ad ogni polimero sul reticolo originario un cammino self-avoiding omotopo al punto[3] sul nuovo reticolo. Questa è una conseguenza del fatto che i cammini omotopi al punto sulla superficie da noi descritta (cfr. fig. 5.3) sono tali per cui per ogni passo su un bond di tipo τ prima o poi il cammino deve ritornare sul bond ad esso parallelo. Alla figura 5.4 si analizza la possibilità di attribuire dei pesi ai cammini consistentemente con i pesi dei polimeri. Tali attribuzioni sono imposte dal seguente sistema

$$\begin{cases} 1 = R_i \left(1 + \rho_{ij}\rho_{ij'}\rho_{ij''}\right) \\ e^{-\beta(K_i + J_{ij}/2)} = R_i\, \tau_{ij}\rho_{ij'}\rho_{ij''} \\ e^{-\beta(K_i + (J_{ij}+J_{ij'})/2)} = R_i\, \tau_{ij}\tau_{ij'}\rho_{ij''} \\ e^{-\beta(K_i + (J_{ij}+J_{ij'}+J_{ij''})/2)} = R_i\, \tau_{ij}\tau_{ij'}\tau_{ij''} \end{cases} \tag{5.13}$$

[3]Ovvero che si possa “trascinare” sulla superficie fino a ridurlo ad un punto.

che ha soluzione

$$\rho_{ij}\rho_{ij'}\rho_{ij''} = \frac{e^{-\beta K}}{1-e^{-\beta K}}; \quad \tau_{ij} = e^{-\beta J_{ij}/2}\rho_{ij}; \quad R_i = (1+\rho_{ij}\rho_{ij'}\rho_{ij''})^{-1}; \tag{5.14}$$

Nel seguito ci specializzeremo al caso di energie tutte uguali per i vertici del reticolo. L'energia di una configurazione sarà proporzionale al numero complessivo v di vertici in essa presenti, ovvero

$$Z_{\text{simm.}} = Kv + \sum_{\langle ij\rangle} J_{ij} n_{ij}; \tag{5.15}$$

In tal caso il sistema si semplifica un po' (il vantaggio rilevante verrà solo in seguito):

$$\begin{cases} 1 = R\,(1+\rho^3) \\ e^{-\beta(K+J_{ij}/2)} = R\,\tau_{ij}\rho^2 \\ e^{-\beta(K+(J_{ij}+J_{ij'})/2)} = R\,\tau_{ij}\tau_{ij'}\rho \\ e^{-\beta(K+(J_{ij}+J_{ij'}+J_{ij''})/2)} = R\,\tau_{ij}\tau_{ij'}\tau_{ij''} \end{cases} \tag{5.16}$$

ed ha soluzione

$$\rho^3 = \frac{e^{-\beta K}}{1-e^{-\beta K}}; \qquad \tau_{ij} = e^{-\beta J_{ij}/2}\rho; \qquad R = (1+\rho^3)^{-1}; \tag{5.17}$$

Il fattore R è una rinormalizzazione di vertice facilmente assorbita nella funzione di partizione. Si ha così

$$Z_{\text{polim.}} = \sum_{\mathcal{G}_{\text{tree}}} e^{-\beta H[\mathcal{G}_{\text{tree}}]} = R^{-N} \sum_{\Omega_{\text{CvSAW}}} \prod_{\langle ij\rangle_\tau \in \Lambda_{\text{dec.}}} \tau_{ij}^{n_{ij}} \prod_{\langle ij\rangle_\rho \in \Lambda_{\text{dec.}}} \rho^{n_{ij}} = R^{-N} Z_{\text{CvSAW}} \tag{5.18}$$

Dove abbiamo indicato con Ω_{CvSAW} gli insiemi di cammini self-avoiding sui vertici e contraibili (ovvero omotopi al punto), con $\Lambda_{\text{dec.}}$ il nuovo reticolo decorato, e con $\langle ij\rangle_{\tau,\rho}$ i bond di tipo rispettivamente τ e ρ. Abbiamo così mappato un problema di polimeri ramificati in un problema di cammini self-avoiding sui vertici e contraibili. Notiamo che la condizione di essere self-avoiding anche sui bond segue da quella sui vertici e dal fatto che il reticolo è orientato.

Quale vantaggio abbiamo ottenuto? Potremmo provare ad utilizzare il metodo di Kac e Ward visto in precedenza anche per questo problema. Scopriremo nel seguito che è possibile fare qualcosa di molto simile, ma che le dimostrazioni che giustificavano il procedimento vanno adeguatamente generalizzate. Dovremo dimostrare:

1. che è possibile esprimere Z in forma esponenziale a vista, sviluppando l'energia libera in termini di cammini contraibili, non necessariamente self-avoiding. Ovvero che vale[4]

$$\sum_{\Omega_{\mathrm{CvSAW}}} \prod_{\langle ij \rangle_\tau \in \Lambda_{\mathrm{dec.}}} \tau_{ij}^{n_{ij}} \prod_{\langle ij \rangle_\rho \in \Lambda_{\mathrm{dec.}}} \rho^{n_{ij}} = \exp\Big[\sum_{\omega_{\mathrm{CW}}} f(\omega) \prod_{\langle ij \rangle_\tau \in \Lambda_{\mathrm{dec.}}} \tau_{ij}^{n_{ij}} \prod_{\langle ij \rangle_\rho \in \Lambda_{\mathrm{dec.}}} \rho^{n_{ij}} \Big] \tag{5.19}$$

per una certa attribuzione dei pesi $f(\omega)$. Il fulcro di questa dimostrazione sta nel mostrare che l'operazione di "scambio" di due terminazioni porta insiemi di cammini contraibili in insiemi di cammini contraibili;

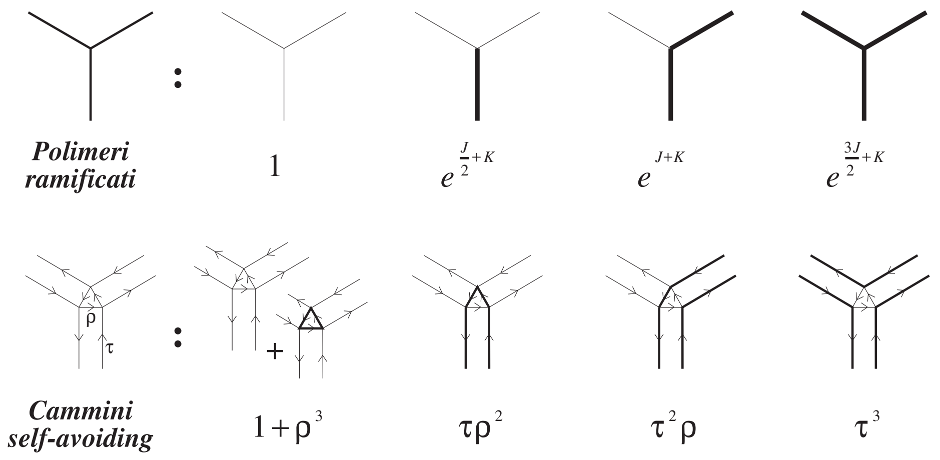
2. che il peso $f(\omega)$ da attribuire a ciascun cammino è ancora legato al numero di autointersezioni del cammino. A tal fine ci servirà dimostrare che il numero di intersezioni reciproche di due cammini contraibili è sempre pari, come avviene nel caso planare;

3. che esiste un sistema di equazioni ricorsive che permette di implementare sia il calcolo di questo peso topologico $f(\omega)$, che del peso termodinamico, riconducibile all'energia delle configurazioni, e che questo sistema di equazioni può essere ricondotto ad un sistema finito dimensionale in virtù della simmetria del reticolo.

Rimandiamo alla sezione 6.6 per la dimostrazione del fatto che, dato un ensemble di insiemi di cammini non backtracking, chiuso rispetto

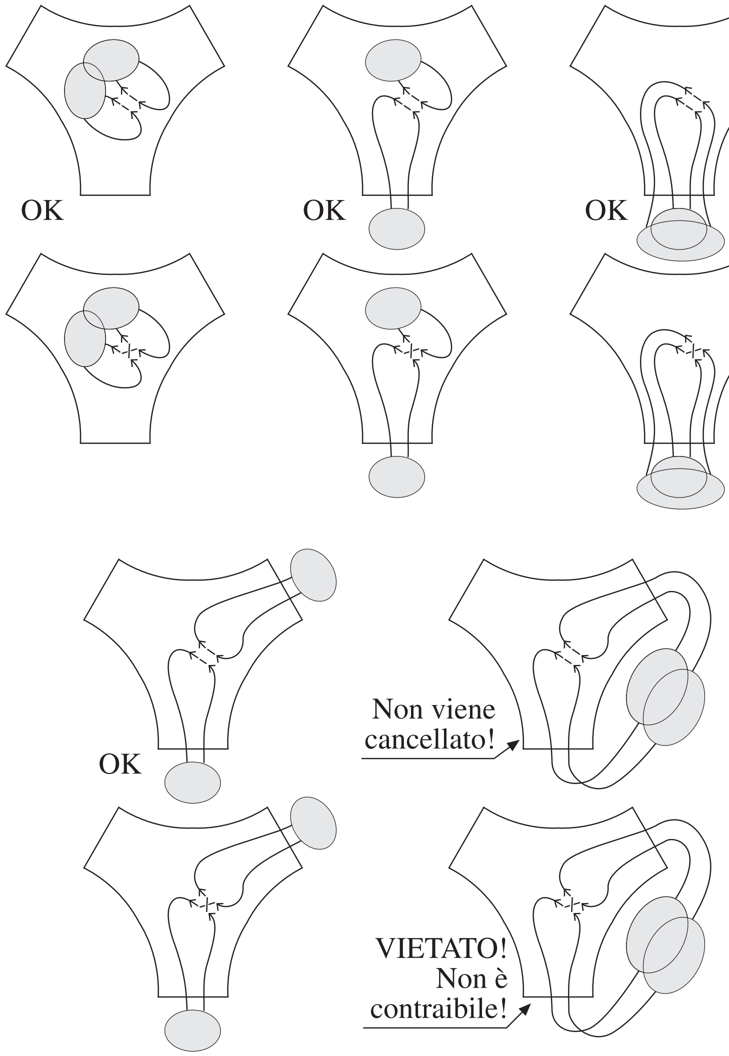
[4]CW = cammini contraibili.

Figura 5.4: *Imposizione della coincidenza fra i pesi di un polimero e di un cammino self-avoiding omotopo al punto.*



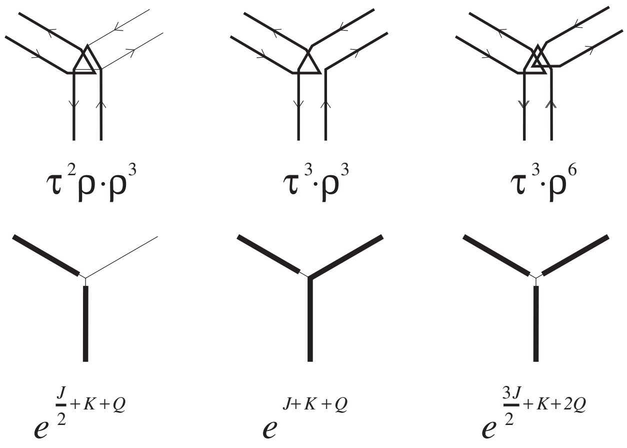
all'operazione di trasporre due coppie di terminazioni di una autointersezione, è possibile scrivere la funzione di partizione nella forma (5.19). Aggiungiamo soltanto che nel nostro caso di reticolo orientato tutti i cammini sono banalmente non backtracking. Proviamo adesso a mostrare che un insieme di cammini contraibili va in un insieme di cammini contraibili scambiando due coppie di terminazioni.

Figura 5.5: *Meccanismo di cancellazione e termini residui.*



Le terminazioni individuano due archi di cammino. Se nessuno di questi archi esce dal "modulo costruttivo" del nostro reticolo mostrato in figura 5.3 il fatto è ovvio. Infatti tutti i cammini siffatti sono contraibili, e ci riconduciamo al fatto già noto. Se uno solo di tali archi esce la dimostrazione è altrettanto facile: infatti lo scambio non fa che attaccare o staccare un frammento di cammino che non esce mai dal modulo, e quindi non influenza l'essere o meno contraibile del rimanente arco. Se entrambi gli archi escono dal modulo, ed escono dallo stesso "braccio", allora la proprietà di essere contraibili si conserva dopo lo scambio. Ciò non avviene in generale se i due archi escono da bracci diversi. Più precisamente, avviene se e solo se i due archi appartengono a cammini diversi. Infatti in questo caso lo scambio crea un unico cammino contraibile, mentre nel caso opposto crea due cammini che percorrono, affiancati ed in verso opposto, dei loop non contraibili (cfr. fig. 5.5). Essendo questa la sola situazione in cui i polimeri non perfettamente ramificati non si compensano, possiamo decidere di ammettere nel nostro ensemble questi termini che non si cancellano, ed introdurre una sorta di vertici spurii (cfr. fig. 5.6).

Figura 5.6: *Vertici spurii e loro peso.*



Vediamo come la presenza di tali vertici modifica il nostro ensemble: abbiamo ancora un gas di polimeri senza overlap ammessi, ma adesso, anzichè avere soltanto polimeri ad albero, abbiamo anche polimeri con circuiti chiusi, pesati col numero di modi in cui possono essere disegnati come un albero ($STN(\mathcal{G})$, *spanning tree number* di $\mathcal{G}$), ed un fattore ρ^3 per ogni legame che devo staccare per compiere questa operazione.

In virtù della nota formula di Eulero, questo numero è pari al numero di circuiti c del grafo originario, per il quale a sua volta vale la relazione

$$c = l - v + p; \tag{5.20}$$

dove l è il numero complessivo di lati dei polimeri, v il numero di vertici, e p il numero di polimeri del grafo. Avremo così le seguenti hamiltoniana e funzione di partizione modificate:

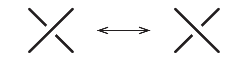
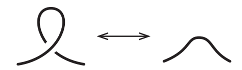
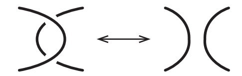
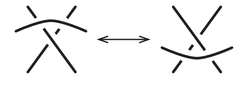
$$H[\mathcal{G}] = Kv + Qc + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} n_{ij}; \tag{5.21}$$

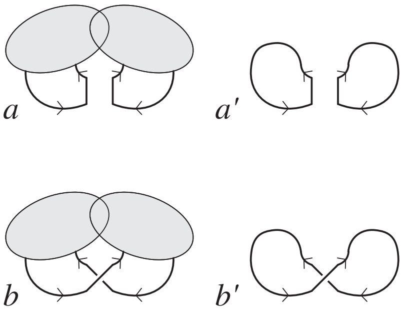
$$\begin{aligned} Z &= R^{-N} \sum_{\mathcal{G}} STN(\mathcal{G})\, e^{-\beta H[\mathcal{G}]} \\ &= (1+\rho^3)^N \sum_{\mathcal{G}} STN(\mathcal{G}) \cdot (\rho^3)^c \cdot \left(\frac{\rho^3}{1+\rho^3} \right)^v \cdot \prod_{\langle ij \rangle} \left(\frac{\tau_{ij}^2}{\rho^2} \right)^{n_{ij}} \end{aligned}$$

(utilizziamo qui la formula di Eulero)

$$= (1+\rho^3)^N \sum_{\mathcal{G}} STN(\mathcal{G}) \cdot (1+\rho^3)^c \cdot \left(\frac{\rho^3}{1+\rho^3} \right)^p \cdot \prod_{\langle ij \rangle} \left(\frac{\tau_{ij}^2 \rho}{1+\rho^3} \right)^{n_{ij}} \tag{5.22}$$

Figura 5.7: *Verifica sulle mosse di Rademaster del fatto che coppie di cammini contraibili hanno un numero pari di intersezioni reciproche.*

Mossa	*Trasformazione*	Δn^o *di intersezioni*
Ω_{extra}		0
Ω_1		-1
Ω_2		-2
Ω_3		0



$$(-1)^{\text{n}^o \text{ di intersezioni di } (a)} = (-1)^{\text{n}^o \text{ di intersezioni di } (a')} = -(-1)^{\text{n}^o \text{ di intersezioni di } (b')} = -(-1)^{\text{n}^o \text{ di intersezioni di } (b)}$$

Dobbiamo dimostrare ancora i rimanenti due punti dei tre esposti sopra, per questo problema modificato. In particolar modo vorremo dimostrare che il peso da attribuire a ciascun cammino è legato al numero delle sue autointersezioni. Ancora una volta facciamo appello alla dimostrazione già impostata alla sezione 4.4, per il teorema 4.4.1. In quel caso si faceva uso della planarità del grafo soltanto per poter affermare che i due insiemi di cammini prima e dopo l'operazione di scambio avevano dei numeri complessivi di intersezioni con parità opposte, o, equivalentemente, che i due archi di cammino si potevano contrarre ad un punto con la sola applicazione delle mosse di Rademaster estese. Questo, però, è immancabilmente vero anche in questo caso, essendo questa proprietà contenuta nella definizione di cammino contraibile. Per comodità di lettura, riportiamo in figura 5.7 un analogo della figura 4.6.

Il terzo punto, sulla implementabilità del calcolo, verrà sviluppato nella sezione seguente. Prima di inoltrarci nella soluzione, però, è forse utile cercare di capire più a fondo la natura del problema che stiamo trattando.

5.3 Ancora sul problema dei dimeri.

Torniamo ad analizzare l'espressione (5.22). Il nostro problema chiaramente non è stato generalizzato dall'introduzione dei vertici spurii, poiché il buon funzionamento del meccanismo delle cancellazioni non lascia un numero sufficiente di parametri liberi per scegliere indipendentemente J_{ij}, K, e Q. Ciò non di meno è possibile studiare il caso interessante in cui si annulla la probabilità di avere circuiti. Questo avviene per $1+\rho^3 \to 0^+$, valore per cui anche il fattore di rinormalizzazione R ed il fattore associato al numero di polimeri tendono ad una singolarità. Anche il fattore associato a ciascun passo è in pericolo, ma per esso possiamo ancora utilizzare τ_{ij} per controbilanciare l'andamento singolare di $1+\rho^3$. Anzi, in particolare, chiamando $(1+\rho^3) = \varepsilon \to 0^+$, si ha

$$Z \simeq \sum_{\mathcal{G}} STN(\mathcal{G}) \cdot \varepsilon^c \cdot \left(-\frac{\tau^2}{\rho^2}\frac{1}{\varepsilon}\right)^l \cdot \left(-\frac{1}{\varepsilon}\right)^n \tag{5.23}$$

e quindi, se vogliamo rinormalizzare la teoria in modo da renderla significativa, dato che ogni polimero sarà composto da almeno un lato, dovremo avere

$$-\frac{\tau^2}{\rho^2}\frac{1}{\varepsilon} = -\tau_0^2 \varepsilon \quad \to \quad \tau = \tau_0\, \varepsilon\, e^{i\frac{2\pi}{3}}; \tag{5.24}$$

In questo limite ogni polimero costituito da un solo dimero ha peso τ_0^2 regolare, mentre in generale polimeri di l lati hanno peso $\sim \varepsilon^{l-1}$. Il problema diventa così un problema di dimeri.

Possiamo dire di più: abbiamo affermato sopra che ciascuno dei nostri polimeri deve avere almeno un lato. Questo sarà imposto dalle nostre cancellazioni. Nella serie, però, compariranno anche dei cammini che corrispondo a polimeri di zero passi (cammini che compiono soltanto passi di tipo ρ), ovvero tutti e soli i cammini che fanno un numero arbitrario di giri intorno al triangolo che sta al centro di ciascun modulo. È una utile verifica dei nostri risultati il fatto che questo contributo sia dato da

$$F_{\substack{\text{cammini corrisp.}\\ \text{a polim. con } l=0}} = N \sum_{\substack{g=1\\ \text{(num. di giri)}}}^{+\infty} \frac{(-1)^{g+1}}{g}\rho^{3g} = N\ln(1+\rho^3) = -\ln R^{-N} \tag{5.25}$$

ovvero esso è interamente compensato dal fattore di rinormalizzazione da noi introdotto. Naturalmente il fatto che nel limite $\varepsilon \to 0^+$ tali contributi divergano, ed inoltre che venga lambito il raggio di convergenza della serie del logaritmo[5], rendono particolarmente delicato l'argomento visto sopra.

5.4 Implementazione del calcolo.

A patto di riservare la debita attenzione a questi limiti, quindi, adesso ci manca soltanto un metodo pratico per implementare il calcolo. A tal fine è utile fare una osservazione: dato un cammino, per ogni sua porzione contenuta in un modulo, che esca all'esterno con un certo numero di "bracci", il numero di autointersezioni complessivo ha la stessa parità della somma dei numeri di autointersezioni di ciascun braccio e delle intersezioni presenti all'interno del modulo.

L'idea è di introdurre delle quantità $X_{ij}(l)$, pari alla somma su tutti i cammini aperti con $2l$ passi di tipo τ, che partono dal bond $\langle ij\rangle$ e terminano sul bond $\langle ji\rangle$, la cui "chiusura" con l'aggiunta del bond ρ_i è un cammino contraibile, del prodotto dei loro pesi termodinamici $(\prod \tau_{ij}, \rho, \cdots)$, ed un segno più o meno a seconda della parità del numero di autointersezioni. Per queste quantità è possibile scrivere delle formule ricorsive (vedi fig. 5.8)

$$\begin{aligned} X_{ij}(l) = {} & \frac{\tau_{ij}\rho^2}{1+\rho^3}\delta_{l-1} + \frac{\tau_{ij}\rho}{(1+\rho^3)^2}(\tau_{ij'}X_{j'i}(l-2) + \tau_{ij''}X_{j''i}(l-2)) \\ & + \frac{\tau_{ij}\tau_{ij'}\tau_{ij''}(1-\rho^3)}{(1+\rho^3)^3}\sum_{l'} X_{j'i}(l')X_{j''i}(l-3-l'); \end{aligned} \tag{5.26}$$

più comodamente riscritte in trasformata di Fourier (eventualmente, per migliorare la convergenza, di Laplace) per l

$$\begin{aligned} \hat{X}_{ij}(\lambda) = {} & \frac{\tau_{ij}\rho^2}{1+\rho^3}e^{i\lambda} + \frac{\tau_{ij}\rho}{(1+\rho^3)^2}(\tau_{ij'}\hat{X}_{j'i}(\lambda) + \tau_{ij''}\hat{X}_{j''i}(\lambda))e^{2i\lambda} \\ & + \frac{\tau_{ij}\tau_{ij'}\tau_{ij''}(1-\rho^3)}{(1+\rho^3)^3}\hat{X}_{j'i}(\lambda)\hat{X}_{j''i}(\lambda)e^{3i\lambda}; \end{aligned} \tag{5.27}$$

[5]È appunto per restare dentro il raggio di convergenza del logaritmo che imponiamo il limite dall'alto per ε.

La simmetria del reticolo per l'azione di un sottogruppo discreto di traslazioni spaziali rende finito dimensionale questo sistema di equazioni.

Ogni cammino di l passi di tipo τ interviene in l espressioni del tipo $X_{ij}X_{ji}$. Quindi, a parte il caso $l = 0$, che abbiamo già studiato alla (5.25), avremo

$$F = \sum_l \frac{1}{l} \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{l'} X_{ij}(l') X_{ji}(l - l') = \sum_l \frac{1}{l} \sum_{\langle ij \rangle} \int_0^{2\pi} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-i\lambda l} X_{ij}(\lambda) X_{ji}(\lambda); \tag{5.28}$$

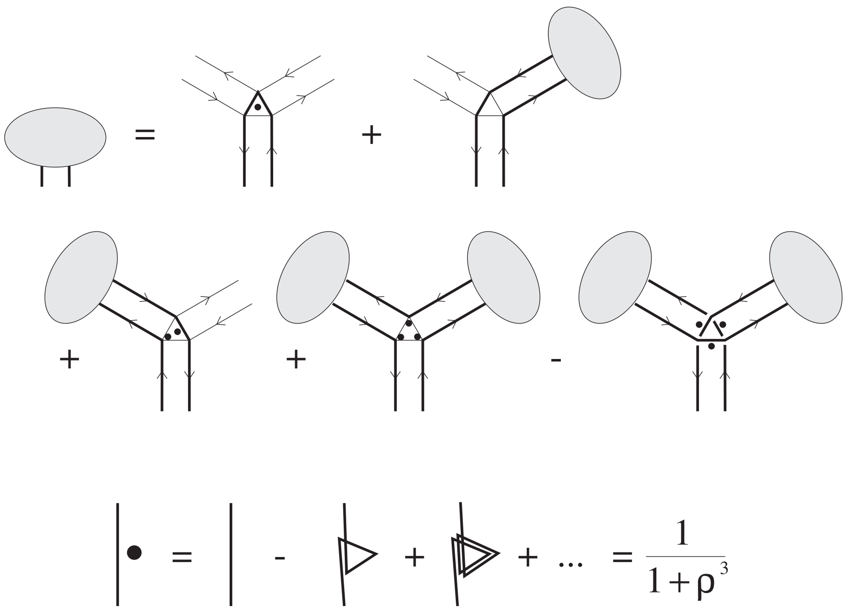
o meglio, se si pone $\tau_{ij} \to t \cdot \tau_{ij}|_{t=1}$, si ha

$$\frac{\partial}{\partial t} F(t) = \sum_{\langle ij \rangle} X_{ij} X_{ji}; \qquad F(t = 0) = 0; \tag{5.29}$$

dove abbiamo posto $X_{ij} = \sum_l X_{ij}(l)$, quantità per le quali, per linearità del sistema (5.26), vale

$$\begin{aligned} X_{ij} = \frac{t\,\tau_{ij}\rho^2}{1+\rho^3} &+ t^2 \frac{\tau_{ij}\rho}{(1+\rho^3)^2} (\tau_{ij'} X_{j'i} + \tau_{ij''} X_{j''i}) \\ &+ t^3 \frac{\tau_{ij}\tau_{ij'}\tau_{ij''}(1-\rho^3)}{(1+\rho^3)^3} X_{j'i} X_{j''i}; \end{aligned} \tag{5.30}$$

Figura 5.8: *Equazioni ricorsive per il calcolo delle funzioni $X_{ij}(l)$.*



Non resta quindi che risolvere il sistema nel caso specifico, ed integrare la derivata dell'energia libera da zero ad uno nella variabile t.

Capitolo 6

Metodo di Kac e Ward generalizzato.

Al capitolo 4 abbiamo mostrato come il modello di Ising su reticolo bidimensionale planare, una volta mappato in un problema di cammini bSAW, permetteva di scrivere l'espressione per l'energia libera come una serie nei cammini non backtracking sul reticolo, dove ciascun termine compariva con un segno dipendente dalla parità del numero di autointersezioni del cammino.

Questa serie è stata poi risommata in maniera esatta, in seguito ad una semplice applicazione dei metodi standard per i random walks. Il punto cruciale è stato il calcolo in forma chiusa del fattore con cui appare ogni termine della serie, e la sua implementabilità attraverso i metodi standard.

Noi mostreremo in questo capitolo che il procedimento riassunto sopra può essere eseguito per reticoli generici, e per funzioni di correlazione ad un numero generico di variabili, con l'unica eccezione dell'ultimo punto, che porta alla non risommabilità della serie in maniera esatta, ma comunque ci permette di scrivere un interessante sviluppo perturbativo.

Per ragioni di carattere tecnico, mostreremo dapprima questo metodo su un modello leggermente diverso, con cammini vSAW, che, pur presentando caratteristiche molto simili ai nostri bSAW, ci permette di aggirare alcune lungaggini e complicazioni. Come mostreremo nella parte introduttoria del capitolo, tale modello non è soltanto un modello artificioso introdotto *ad hoc*, esso è in relazione con numerosi sistemi già noti in letteratura, e di grande interesse.

6.1 Descrizione del modello.

Siano dati un insieme di punti $\{p_i\}$, e una funzione a un parametro (analogo alla temperatura) delle coppie ordinate di punti $l_\beta(p_i, p_j) : [0, +\infty[\times \{p_i\} \times \{p_i\} \to \mathbb{C}$. Rimarrà definito in maniera naturale un reticolo Λ, dove i bond congiungono coppie di punti per cui $l_\beta(p_i,p_j)$ o $l_\beta(p_j,p_i)$ non siano identicamente nulle. Indicheremo con $\langle ij\rangle$ i bond del reticolo.

In conformità all'appendice A, indicheremo con ω un cammino chiuso (non puntato), ovvero un insieme ordinato di punti, modulo la scelta del primo:

$$\omega = (p_1, \cdots p_L) \equiv (p_l, \cdots p_L, p_1, \cdots p_{l-1}), \tag{6.1}$$

con $\omega : a \to b$ un cammino aperto dal punto p_a al punto p_b,

$$\omega : a \to b = (p_a \equiv p_1, p_2, \cdots p_L \equiv p_b), \tag{6.2}$$

con Ω un insieme non ordinato di cammini chiusi,

$$\Omega = \{\omega_1, \cdots \omega_k\}. \tag{6.3}$$

Sia definito l'ensemble degli insiemi di cammini chiusi self-avoiding sui vertici, Ω_{vSAW} su Λ. Ovvero, definendo $\delta_{vSAW}(\Omega)$ come la funzione che restituisce 1 se tutti i punti del reticolo sono attraversati al più una volta, e zero altrimenti, la misura associata al nostro ensemble sarà

$$\mu^{\mathrm{vSAW}}(\Omega) = \prod_{\omega^\alpha \in \Omega} \mu_0(\omega^\alpha) \cdot \delta_F(\Omega); \tag{6.4}$$

$$\mu_0(\omega) = l_\beta(p_1,p_2) \cdot l_\beta(p_2,p_3) \cdot \; \cdots l_\beta(p_L,p_1); \tag{6.5}$$

La funzione di partizione corrispondente sarà

$$Z_\beta = \sum_{\Omega_{vSAW}} \prod_{\omega^\alpha \in \Omega_{vSAW}} \mu^{\mathrm{vSAW}}(\omega^\alpha). \tag{6.6}$$

Notiamo che l'unica differenza fra l'ensemble di cammini bSAW ottenuto per mezzo dell'espansione di alte temperature a partire dal modello di Ising (cfr. sez. 4.3) e l'ensemble appena definito di cammini vSAW consiste nel fatto che in quest'ultimo sono ammessi i piccoli loop a due passi $\omega = (p_i,p_j)$ sui bond per cui $l(p_i,p_j) \cdot l(p_j,p_i) \neq 0$.

Nel formalismo dei random walks, discusso nell'appendice A, la funzione $l(p_i,p_j)$, vista come matrice che ha come entrate i punti del reticolo, è chiamata matrice di transfer M_{ij}.

Ricordiamo che è facile calcolare esattamente la funzione di partizione per il problema di random walks liberi associato anche alla nostra matrice di transfer (vedi sezione 2.7).

$$Z_0 = \exp \sum_\omega \mu_0(\omega); \tag{6.7}$$

$$\sum_\omega \mu_0(\omega) = \sum_L \frac{1}{L} \operatorname{tr} M^L = -\ln\det(I-M) \tag{6.8}$$

Analogamente avremo in generale una espressione esplicita per il propagatore libero fra due punti

$$G(p_a, p_b) = \sum_{\omega:a\to b} \mu(\omega) = \Big(\sum_L M^L\Big)_{ab} = \big(I - (I-M)^{-1}\big)_{ab}. \qquad (6.9)$$

Scegliamo di dare un ordinamento (arbitrario) sui punti di Λ.

Nostro fine in questo capitolo sarà trovare uno sviluppo perturbativo per l'energia libera e le funzioni di correlazione a q punti, per il modello vSAW introdotto.

$$F = -\frac{1}{\beta}\ln Z_0 + F^{(1)} + F^{(2)} + \cdots ; \qquad (6.10)$$

$$F^{(k)} = \sum_{p_1 < \ldots < p_k} \Phi^{(k)}(G(p_i, p_j)); \qquad (6.11)$$

dove le funzioni $\Phi^{(k)}$ non dipendono dal reticolo Λ, e saranno trovate con un algoritmo ricorsivo alla fine di questo capitolo, ed esplicitamente al capitolo 7.

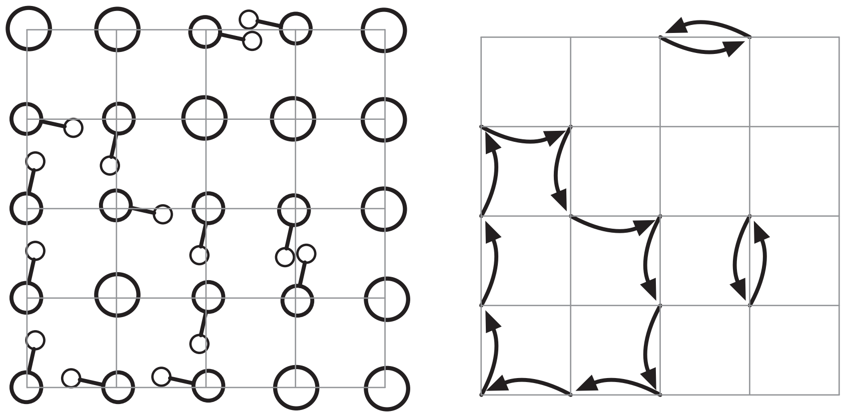
Il nostro parametro di sviluppo non ha una interpretazione immediata (torneremo sull'argomento nel prossimo capitolo), ma le troncate k-ime del nostro sviluppo restituiscono la serie di alte temperature (ovvero, ridefinendo $M_{ij} \to \tau M_{ij}$, nel parametro τ) esatta fino all'ordine $2k$-imo. Infatti ciascuna $\Phi^{(k)}$, se espressa come serie di Taylor nelle G_{ij}, contiene soltanto termini di ordine almeno $2k$, e la serie del propagatore libero, per qualunque coppia di punti, consiste di almeno un passo.

6.2 Interpretazioni fisiche dei modelli vSAW

Alla sezione precedente abbiamo definito matematicamente un problema vSAW su reticolo con matrice di transfer generica (ovvero senza particolari proprietà di simmetria). La vera ragione per aver introdotto questo modello è che per esso è più facile costruire la nostra serie. In questa sezione mostreremo alcuni modelli fisici che possono ragionevolmente essere schematizzati con un problema vSAW di questo genere.

Il primo di essi è un modello con regole del ghiaccio, per miscela annealed di molecole con un solo legame idrogeno (tipo A), e molecole senza legami idrogeno (tipo B). Esso viene mappato in un modello di vSAW su reticolo con matrice di transfer simmetrica. Infatti è possibile schematizzare il legame idrogeno come una freccia che unisce una molecola di tipo A ad una molecola di tipo A adiacente. Le frecce formeranno dei cammini chiusi vSAW sul reticolo. L'adozione di un potenziale chimico differente per molecole A e B porta ad un peso per le configurazioni riconducibile ai fattori di una matrice di transfer simmetrica. Il procedimento che mappa un modello nell'altro

Figura 6.1: *Configurazione tipica per il problema della miscela annealed di molecole ad uno e zero legami ad idrogeno e corrispondente configurazione per il problema vSAW con matrice di transfer simmmetrica ad esso associato.*

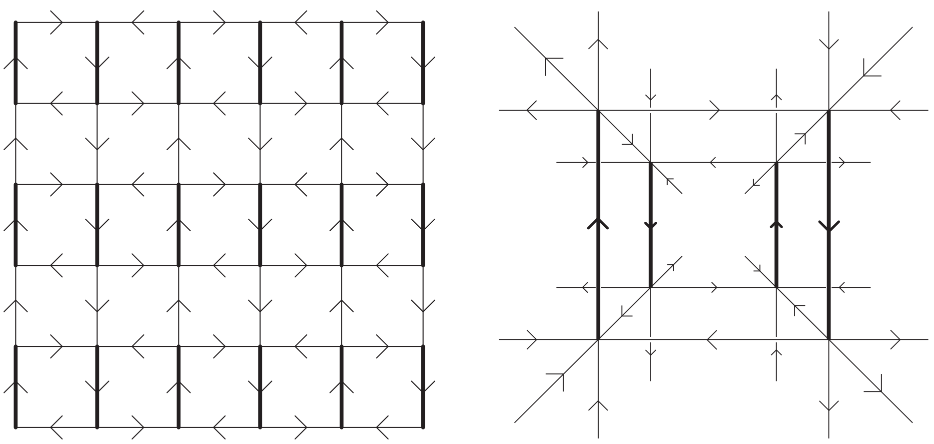


è valido in qualunque dimensione. L'equivalenza fra il problema e la sua riformulazione è mostrata in figura 6.1

Il secondo è un modello di CpDC su reticolo ipercubico. È noto che esistono numerosi sistemi fisici, tipicamente mutuati dalla chimica, ben descritti da un problema di CpDC.

Data una configurazione di dimeri, ed una di riferimento, l'insieme dei bond con numeri di occupazione diversi nelle due configurazioni corrispon-

Figura 6.2: *Configurazioni di riferimento per problemi di dimeri su reticolo cubico in $D = 2$ e $D = 3$, ed assegnazione degli orientamenti dei bond per mappare il problema in un problema di vSAW su reticolo orientato.*



derà a dei cammini vSAW. La matrice di transfer si trova facilmente a partire dall'asegnazione dei potenziali chimici dei dimeri.

Mostriamo in figura 6.2 per quale particolare scelta dell'orientazione sul reticolo e della configurazione di riferimento per i dimeri si ha l'equivalenza fra il modello dei dimeri ed il problema di vSAW, precisando che questa non è l'unica scelta possibile.

6.3 Prima serie per l'energia libera

Consideriamo il reticolo "esteso" che si ottiene a partire da $\{p_i\} \times [0,1]$ anziché da $\{p_i\}$. Nella espressione dei cammini compariranno, accanto ai punti p_i, delle coordinate ausiliarie $x_i \in [0,1]$

$$\omega = (p_1, x_1; \cdots p_L, x_L); \tag{6.12}$$

la misura sarà modificata in

$$d\mu(\omega) = \prod [l(p_i, p_{i+1}) \cdot dx_i]; \tag{6.13}$$

E di conseguenza verranno leggermente modificate in forma le quantità introdotte:

$$Z^0 = \exp \int \sum_{\omega} d\mu(\omega); \tag{6.14}$$

$$Z = \int \sum_{\Omega_{vSAW}} \prod_{\omega^\alpha \in \Omega_{vSAW}} d\mu(\omega^\alpha); \tag{6.15}$$

$$dG(p_a, x_a; p_b, x_b) = \int \sum_{\omega: a \to b} d\mu(\omega). \tag{6.16}$$

In seguito a tale modifica sia Z^0 che Z rimangono immutate in valore, mentre per il propagatore libero varrà

$$dG(p_a, x_a; p_b, x_b) = G(p_a, p_b)\, dx_a. \tag{6.17}$$

Questa manipolazione ci permette di ordinare, seppure arbitrariamente, gli attraversamenti multipli dello stesso sito. Tale dettaglio sarà utile nel seguito.

Un cammino chiuso generico ω può essere visto come un insieme ordinato di punti ad occupazione multipla $(p_1, \cdots p_k)$, con numeri di occupazione rispettivamente $(m_1, \cdots m_k \geq 2)$, ed archi di cammino a congiungere tra loro le $M = \sum m_i$ terminazioni $(p_1^{(1)}, \cdots, p_1^{(m_1)}; \cdots, p_k^{(m_k)})$. Tali archi di cammino saranno self-avoiding nei vertici, in quanto abbiamo già esplicitato in $(p_1, \cdots p_k)$ tutti i punti attraversati più di una volta

Le sole informazioni costituite dalla stringa dei numeri di occupazione maggiori di uno e dalla successione degli attraversamenti riassumono la "forma" del cammino, le sue caratteristiche topologiche, e determinano delle classi di equivalenza per l'insieme dei cammini, che chiameremo *diagramma* associato ad un certo cammino, o $\chi(\omega)$.

Nel seguito del paragrafo mostreremo il seguente

Teorema 6.3.1.

$$\exists f : \{\chi\} \to \{-1,+1\} \quad / \quad Z = \exp \int \sum_{\omega} d\mu(\omega)\ f(\chi(\omega)). \tag{6.18}$$

Proof. Riesprimiamo la tesi sviluppando la funzione esponenziale, e riconosciamo che i fattoriali a dividere i termini della serie sono compensati dal numero di volte in cui ciascun termine compare. In virtù di questa osservazione, la tesi diviene

$$Z = \sum_{\Omega} \prod_{\omega^\alpha \in \Omega} \int d\mu(\omega^\alpha)\ f(\chi(\omega^\alpha)), \tag{6.19}$$

Notiamo che una formula così semplice è anche frutto dell'introduzione delle nostre variabili ausiliarie x_i. In loro assenza, a moltiplicare il peso di ogni Ω avremmo avuto dei fattori correttivi derivanti dal giusto conteggio di cammini "identici".

Per ciascun insieme di cammini Ω definiamo il suo supporto $\Omega|_s$ come il grafo composto dai bond di Λ, ciascuno preso tante volte quante è attraversato da Ω. Definiamo in maniera analoga il supporto di un cammino singolo. Introduciamo per i supporti la (naturale) nozione di connessione valida per i grafi. Ad esempio, il supporto di un cammino è sempre connesso, mentre il supporto di due cammini lo è soltanto se essi hanno intersezioni reciproche, e così via.

Un insieme di cammini Ω avrà un supporto costituito, in generale, da più porzioni connesse C_i

$$\Omega|_s = \bigcup C_i\,; \qquad \begin{array}{c} C_i \text{ connessi;} \\ C_i \cap C_j = \emptyset. \end{array} \tag{6.20}$$

Per ogni elemento di integrazione nella (6.19), associato ad un certo Ω, raccogliamo i fattori corrisponenti a cammini che appartengono alla stessa porzione connessa C_i del suo supporto.

$$Z = \sum_{\Omega} \prod_{C_i \in \Omega|_s} \prod_{\omega^\alpha \in C_i} \int d\mu(\omega^\alpha)\ f(\omega^\alpha) \tag{6.21}$$

Risommiamo adesso sulle configurazioni che hanno lo stesso supporto. Rimarrà una somma sui supporti possibili, ed il peso di ciascun termine sarà fattorizzato sulle singole porzioni connesse di cui è composto. Ognuno di tali pesi, inoltre, sarà il prodotto di una parte "topologica", pari alla somma, su tutti i modi in cui posso reinterpretare la porzione di supporto in termini di cammini, del prodotto delle $f(\omega^\alpha)$ associate a ciascun cammino, e di una parte "termodinamica", che fattorizza fuori da questa somma.

$$Z = \sum_{\Omega|_s} \prod_{C_i \in \Omega|_s} \int d\mu(C_i) \sum_{\Omega'/\Omega'|_s = C_i} \prod_{\omega^\alpha} f(\omega^\alpha). \tag{6.22}$$

Confrontiamo questa espressione con quella alla (6.15), che definiva il nostro modello:

$$Z = \sum_{\Omega_{vSAW}} \prod_{\omega^\alpha \in \Omega_{vSAW}} \int d\mu(\omega^\alpha), \tag{6.23}$$

Troviamo così una condizione sufficiente affichè valga il teorema: ci basterà trovare una f tale che, per ogni supporto ed elemento di misura $\prod dx_i$ (cioè ogni insieme di cammini a supporto connesso "quozientato" l'ordine in cui sono attraversati i siti), si abbia:

$$\forall C \qquad \prod dx_i \sum_{\Omega/\Omega|_s = C} \prod_{\omega^\alpha} f(\omega^\alpha) = \begin{cases} \prod dx_i & C = \omega_{vSAW} \\ 0 & C \neq \omega_{vSAW} \end{cases} \tag{6.24}$$

Daremo nel seguito una formula ricorsiva per $f(\omega)$ che risolva il sistema di equazioni (6.24). A tal fine è utile introdurre una gerarchia sul nostro insieme. Definiremo *ordine* di un cammino ω come

$$\#(\omega) = \sum_{p_i} \frac{n(p_i)(n(p_i) - 1)}{2}. \tag{6.25}$$

Notiamo immediatamente che tale funzione assume come valori soltanto interi positivi, e vale zero se e solo se il cammino è vSAW. Una identica nozione di ordine si può definire per i supporti.

Procediamo induttivamente sull'ordine dei cammini per trovare una $f(\omega)$ coerente con le (6.24). Il passo zero è:

$$f(\omega_{vSAW}) = 1 \tag{6.26}$$

Questa attribuzione soddisfa tutte le equazioni del sistema (6.24) di ordine zero[1], e lascia alcune variabili incognite in quelle di ordine maggiore.

[1] chiameremo *ordine di una equazione* l'ordine del supporto ad essa associato.

Supponiamo, quindi, di aver attribuito una $f(\omega)$ a tutti i cammini di ordine minore di n, e di aver soddisfatto tutte le equazioni di ordine minore di n.

Nelle equazioni di ordine n sono rimaste incognite le sole f corrispondenti ai cammini singoli che "attraversano" tutto il supporto, in quanto essi hanno ordine pari a quello del supporto. Al contrario, quando il supporto viene interpretato come unione di due o più cammini, ciascuno di essi ha ordine minore di n, e quindi il prodotto delle loro f è noto.

Dovremmo mostrare che è possibile scegliere le f corrispondenti a tali cammini in modo tale da soddisfare tutte le equazioni di ordine n. Noi mostreremo una proprietà leggermente più forte: mostreremo che, raccolti a coppie secondo una certa regola gli addendi a primo membro di ciascuna (6.24), è possibile scegliere le f in modo tale che la somma dei pesi all'interno di ciascuna coppia faccia zero, a eccezione del caso $C = \omega_{vSAW}$, in cui vi è un solo addendo. In tal senso rafforzeremo anche l'ipotesi induttiva.

In analogia a quanto già visto, anche per le interpretazioni in termini di cammini di un supporto esistono delle classi $\chi(C)$ che riassumono la "forma" dei cammini. Le configurazioni che raccoglieremo in una coppia sono quelle che, in quanto alla loro "forma" χ, differiscono soltanto per una trasposizione delle prime due terminazioni del primo punto ad occupazione multipla (vedi fig. 6.3).

Ricordiamo che è stato dato un ordinamento sui punti del reticolo, quindi è ben definito un primo punto ad occupazione multipla, a meno che il supporto non sia un cammino self-avoiding, caso già discusso. Ricordiamo anche che l'introduzione delle variabili ausiliarie ci permette di distinguere le prime due terminazioni fra quelle di un dato punto, e quindi di trasporre fra loro gli archi di cammino che partono da esse.

Possono verificarsi due casi:

1. una delle due configurazioni della coppia consiste di un solo cammino;

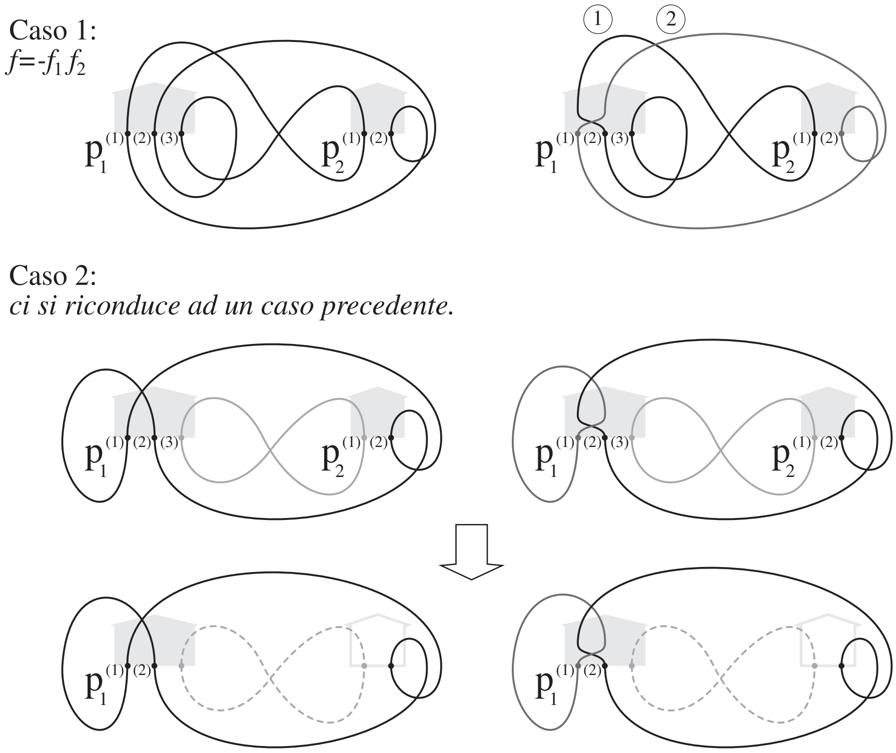
2. nessuna delle due configurazioni della coppia consiste di un solo cammino[2].

Il primo caso è semplice. Il peso del cammino singolo va deciso. Esso rimane determinato dall'imposizione di essere l'opposto del peso dell'altro elemento nella coppia, composto da due cammini.

Il secondo ci pone un problema di verifica. Entrambi i pesi sono già stati assegnati. Soddisferanno la nostra condizione? Consideriamo per il nostro insieme di cammini (uno dei due) la porzione connessa alle due terminazioni su cui agisce la trasposizione. Il suo supporto è strettamente contenuto nel supporto iniziale, quindi ha ordine strettamente minore, e l'equazione ad esso

[2]Si vede facilmente che il terzo caso che potrebbe venire in mente, cioè entrambe le configurazioni consistenti di un solo cammino, è in realtà impossibile.

Figura 6.3: *Algoritmo di assegnazione dei pesi $f(\chi)$ e verifica di consistenza.*



associata è già stata soddisfatta, coppia per coppia, per l'ipotesi induttiva rafforzata. Sia un ordinamento dei punti del reticolo che il meccanismo di scelta delle prime due terminazioni su un dato punto sono stabili per inclusione, cioè, dato un certo supporto, e identificate le due terminazioni da trasporre, su un sottosupporto che le contiene la scelta cadrà nuovamente su di esse. Inoltre il peso di quei cammini che appartengono al supporto iniziale ma non al sottosupporto, fattorizza. Concludiamo quindi che il secondo caso si riconduce al primo, per supporti di ordine più basso, e quindi la condizione è soddisfatta per l'ipotesi induttiva. □

6.4 Seconda serie: integrabilità dei termini.

Lo sviluppo ottenuto alla sezione (6.3) non ci soddisfa totalmente. Abbiamo suddiviso l'insieme dei cammini chiusi sul reticolo in classi di equivalenza χ sulla base delle caratteristiche di forma di ciascun cammino, cioè da quante autointersezioni (ordinate) possiede ed in quale sequenza esse sono attraversate. La $f(\omega)$, trovata ricorsivamente, fattorizza su ciascuna classe, cioè è in realtà una $f(\chi(\omega))$, in quanto l'algoritmo usato per determinarla utilizza di un cammino soltanto le informazioni date dalla classe di appartenenza. Noi vorremmo integrare su tutti i cammini ω appartenenti ad una data classe il contributo "termodinamico" $d\mu(\omega)$ ad essi associato. Questo però è molto difficile. Infatti dovremmo sommare su tutti i modi in cui posso mettere sui punti del reticolo le occupazioni multiple (facile), e su tutti i modi in cui le posso congiungere con archi di cammino per cui sia soddisfatta la condizione di essere vSAW, cioè che non abbiano né autointersezioni (molto difficile), né intersezioni reciproche (pressocché impossibile).

Se non ci fosse la condizione di essere vSAW, la somma su tutti gli archi di cammini a congiungere i punti ad occupazione multipla sarebbe il semplice prodotto dei propagatori liberi fra i punti in questione, ed il termine corrispondente a ciascuna classe sarebbe una semplice quadratura.

Possiamo provare ad introdurre delle correzioni successive sui termini della serie, raccolti nelle classi di equivalenza e ordinati seguendo l'ordine già introdotto per i cammini. Le correzioni apparterranno a classi di equivalenza di ordine maggiore, e quindi ciascun termine della serie "corretta" si stabilizzerebbe definitivamente ad un passo finito del procedimento. Abbiamo così la speranza di scaricare la difficoltà insita nel sommare archi di cammino self-avoiding sulla computazione algebrica dei fattori topologici.

Riscriviamo la (6.3.1) mettendo in evidenza le classi di cammini χ, ottenendo

$$Z = \exp \sum_{\chi} f(\chi) \sum_{\substack{\omega \\ \chi(\omega)=\chi}} \int d\mu(\omega) \tag{6.27}$$

O meglio, pensando a ciascun cammino come ad un insieme di archi di cammino self-avoiding a congiungere i punti ad occupazione multipla $(\dots p_i^{(k)}, x_i^{(k)}; \dots)$, potremo riscrivere la (6.27) come

$$Z = \exp \int \sum_{\chi} f(\chi) \sum_{\substack{\omega \\ \chi(\omega)=\chi}} \left(\prod d\mu(p_i^{(k)}, x_i^{(k)}, p_j^{(h)}, x_j^{(h)}) \right) \cdot \delta_{\mathrm{vSAW}} \tag{6.28}$$

Adesso formalizziamo l'idea esposta in apertura di questo paragrafo nel seguente

Teorema 6.4.1.

$$\exists g : \{\chi\} \to \mathbb{Z} \quad / \quad Z = \exp \int \sum_{\chi} g(\chi) \sum_{\substack{\omega \\ \chi(\omega)=\chi}} \prod d\mu(p_i^{(k)}, x_i^{(k)}, p_j^{(h)}, x_j^{(h)}) \tag{6.29}$$

Proof. Definiamo una nozione di inclusione nello spazio delle χ. Diremo che $\chi_1 \subseteq \chi_2$ se fra i cammini costruiti con archi di propagatori liberi a partire da χ_1 ve ne sono alcuni che appartengono alla classe di equivalenza labellata da χ_2 (vedi fig. 6.4). Chiamiamo $\{\chi^{esp}\}_\chi$ l'insieme delle χ_i tali che $\chi_i \supseteq \chi$, e similmente $\{\chi_{rid}\}_\chi$ l'insieme delle χ_j tali che $\chi_j \subseteq \chi$.

Se fosse vero il teorema, avremmo che

$$\ln Z = \int \sum_{\chi' \in \{\chi\}} g(\chi') \sum_{\substack{\omega \\ \chi(\omega)=\chi'}} \prod d\mu_{ij} \tag{6.30}$$

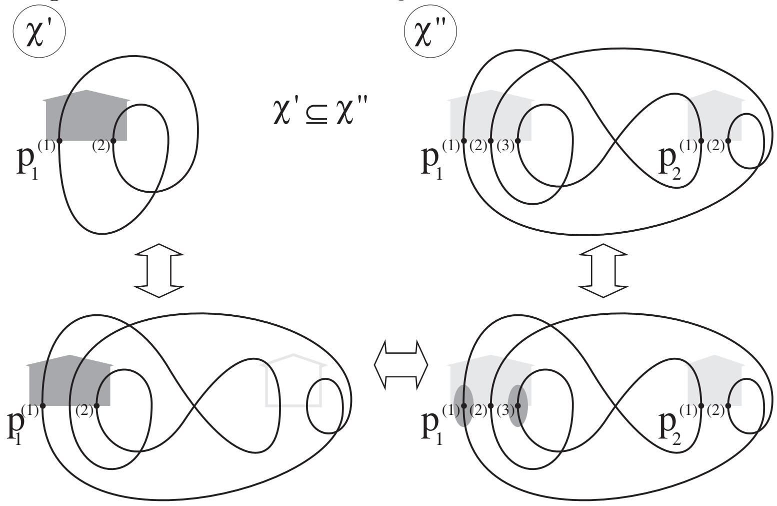
$$= \int \sum_{\chi' \in \{\chi\}} \sum_{\chi'' \in \{\chi^{esp}\}_{\chi'}} g(\chi') \sum_{\substack{\omega \\ \chi(\omega)=\chi''}} \left(\prod d\mu_{ij}\right) \cdot \delta_{\text{vSAW}}$$

dove abbiamo utilizzato la definizione di $\{\chi^{esp}\}_\chi$. Invertendo l'ordine di somma,

$$= \int \sum_{\chi'' \in \{\chi\}} \sum_{\chi' \in \{\chi_{rid}\}_{\chi''}} g(\chi') \sum_{\substack{\omega \\ \chi(\omega)=\chi''}} \left(\prod d\mu_{ij}\right) \cdot \delta_{\text{vSAW}} \tag{6.31}$$

$$= \int \sum_{\chi'' \in \{\chi\}} f(\chi'') \sum_{\substack{\omega \\ \chi(\omega)=\chi''}} \left(\prod d\mu_{ij}\right) \cdot \delta_{\text{vSAW}} \tag{6.32}$$

Figura 6.4: *Esempio di due diagrammi inclusi l'uno nell'altro.*



Abbiamo posto

$$f(\chi'') = \sum_{\chi' \in \{\chi_{rid}\}_{\chi''}} g(\chi') \tag{6.33}$$

Il che, oltre a dimostrare il teorema, definisce l'algoritmo per trovare le $g(\chi)$ a partire dalle $f(\chi)$. $\square$

Analizziamo più approfonditamente la (6.33). Verifichiamo che il sistema di equazioni lineari da essa definito abbia soluzione, e che sia unica.

Se definiamo l'ordine di una equazione come l'ordine del χ'' che in essa compare, allora in una equazione di ordine n avremo una sola incognita di ordine n, ovvero $g(\chi'')$, e tutte le altre $g(\chi')$ avranno ordine strettamente inferiore. Inoltre ciascuna incognita appare come tale in una sola equazione delle (6.33). Se risolviamo il sistema a partire da $g(\chi_{vSAW}) = 1$, troviamo per esso una soluzione unica.

Per rendere tale soluzione più esplicita, possiamo sostituire ricorsivamente le $g(\chi)$ che compaiono in ciascuna equazione, trovando

$$g(\chi) = \sum_{\chi' \in \{\chi_{rid}\}_{\chi}} Ch(\chi, \chi') f(\chi') \tag{6.34}$$

dove

$$Ch(\chi, \chi') = \sum_k (-1)^k \, \#\{\text{catene inclusive strette a } k \text{ elementi fra } \chi \text{ e } \chi'\} \tag{6.35}$$

Le variabili ausiliarie da noi introdotte hanno svolto un ruolo essenziale nel "contar bene" i cammini. Il loro ruolo, però, è adesso relegato alla parte combinatoria del calcolo, cioè quella dovuta al coefficiente topologico $g(\chi)$. Possiamo quindi integrare su di esse per quanto riguarda la parte termodinamica. Per ciascun passo degli archi di cammino liberi l'integrazione è banale, e produce un fattore unitario. Per gli attraversamenti dei link ad occupazione multipla esplicitati in χ, invece, la condizione di ordinamento produce il tradizionale fattore "di simplesso" $\frac{1}{m!}$. Nel calcolare il peso termodinamico associato a ciascun χ, possiamo quindi sostituire i cammini sul reticolo "esteso" (cioè con le variabili ausiliarie) con cammini sul reticolo originario, pagando il semplice fattore $\frac{1}{\prod m_i!}$.

Tutti i χ a cui è associato lo stesso insieme di propagatori liberi, cioè che differiscono soltanto nell'ordine in cui tali archi di cammino sono attraversati, avranno peso termodinamico uguale. È quindi utile definire delle $\bar{\chi}$ come quoziente dell'insieme delle χ rispetto a tale ordine, ed associare ad esse un peso topologico "efficace" $\bar{g}(\bar{\chi})$, pari alla somma dei pesi corrispondenti alle varie χ originarie, e sul quale faremo ricadere anche il fattore "di simplesso" dovuto all'integrazione:

$$\bar{g}(\bar{\chi}) = \frac{1}{\prod m_i!} \sum_{\chi \in \bar{\chi}} g(\chi). \tag{6.36}$$

In definitiva, abbiamo dimostrato che possiamo scrivere la nostra funzione di partizione come

$$Z = \exp \sum_{\bar{\chi}} \bar{g}(\bar{\chi}) \sum_{\omega/\chi(\omega)=\bar{\chi}} \prod \mu(p_i, p_j) = \sum_{\bar{\chi}} \bar{g}(\bar{\chi}) \sum_{p_1<p_2<\cdots<p_k} \prod G(p_i, p_j) \tag{6.37}$$

Il generico $\bar{\chi}$ a k punti è quindi un monomio nelle variabili G_{ij} con $i, j \leq k$, dove ogni indice da 1 a k appare, e ad ogni monomio corrisponde al più un $\bar{\chi}$ [3]. In formule:

$$\bar{\chi}_{(k)} = \prod_{i,j \leq k} G_{ij}^{a_{ij}(\bar{\chi})} \tag{6.38}$$

Il caso corrispondente al $\bar{\chi}$ a 0 punti è un po' particolare: la sua $\bar{g}$ è banalmente 1, mentre il suo peso termodinamico è pari alla somma dei pesi termodinamici dei cammini chiusi non puntati su Λ, quindi proprio $\ln Z^0$.

Come ci eravamo proposti all'inizio del capitolo, abbiamo ottenuto per l'energia libera una espressione della forma

$$\begin{aligned} \mathrm{F} &= \ln Z = \ln Z^0 + F^{(1)} + F^{(2)} + \cdots ; \\ F^{(k)} &= \sum_{p_1<\ldots<p_k} \sum_{\bar{\chi}_{(k)}} \bar{g}(\bar{\chi})\ G(p_i, p_j)^{a_{ij}(\bar{\chi})} \\ &= \sum_{p_1<\ldots<p_k} \Phi^{(k)}(G(p_i, p_j)); \end{aligned} \tag{6.39}$$

dove nei monomi che entrano nello sviluppo in serie di $\Phi^{(k)}$ compaiano a pedice tutti i punti $(p_1, \ldots p_k)$, in quanto ciascuno corrisponde ad un diagramma a k punti. In conclusione, riassumiamo alcune proprietà dello sviluppo in serie appena trovato. Questo piccolo schema verrà richiamato nel prossimo capitolo, in cui troveremo un altro sviluppo, che scopriremo essere identico a questo. A quel punto metteremo insieme le proprietà dimostrate con i due diversi procedimenti.

In questi paragrafi abbiamo dimostrato:

- esiste almeno un modo di scrivere Z nella forma alla (6.39), descritto da un ben preciso algoritmo ricorsivo;

[3] Con particolare riferimento alla loro rappresentazione grafica, chiameremo spesso tali monomi col nome di *diagrammi*.

- per questo nostro particolare sviluppo, le funzioni $\Phi^{(k)}$ sono "universali". La dipendenza dal reticolo Λ è interamente contenuta nell'espressione esplicita dei propagatori liberi;

- i monomi di G_{ij} che compaiono nello sviluppo in serie di $\Phi^{(k)}$ corrispondono a diagrammi connessi a k punti. Questa proprietà sembra scontata e marginale alla luce del nostro procedimento, ma avrà un ruolo non banale nel prossimo capitolo. Fin d'ora possiamo dire che, se $G(p_i, p_j)$ è almeno $\mathcal{O}(\tau)$ per ciascuna coppia di punti, allora $\Phi^{(k)}$ è almeno $\mathcal{O}(\tau^{2k})$.

6.5 Funzione di correlazione a due punti.

Ripercorriamo rapidamente ll procedimento esposto ai paragrafi precedenti per applicarlo al calcolo della funzione di correlazione a due punti.

Se chiamiamo Ω_{ab} l'insieme di un cammino aperto e di un numero generico di cammini chiusi non ordinati,

$$\Omega_{ab} = \{\omega_{ab} : a \to b\,; \omega_1, \cdots \omega_k\}, \tag{6.40}$$

allora definiremo la funzione di correlazione a due punti fra p_a e p_b come

$$\langle p_a p_b \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{(\Omega_{ab})_{\mathrm{vSAW}}} \mu(\Omega_{ab}). \tag{6.41}$$

Come al paragrafo 6.3, consideriamo il reticolo esteso, e di conseguenza la misura e tutte le quantità ad essa associate saranno debitamente modificate.

In analogia a quanto già detto per i cammini chiusi, notiamo come un cammino aperto ω_{ab} può essere visto come l'insieme ordinato dei suoi punti ad occupazione multipla e dei due estremi, più archi di cammino a congiungere le terminazioni. Chiameremo $\chi_{..}$ le classi di equivalenza così ottenute per i cammini aperti. Saremo ora in grado di dimostrare un teorema analogo al (6.3.1):

Teorema 6.5.1.

$$\exists\ f : \{\chi\} \to \{-1, +1\},\ f_{..} : \{\chi_{..}\} \to \{-1, +1\} \quad / \tag{6.42}$$

$$\int \sum_{(\Omega_{ab})_{\mathrm{vSAW}}} d\mu(\Omega_{ab}) = \int \sum_{\omega_{ab}} d\mu(\omega_{ab})\, f_{..}(\chi_{..}) \cdot \exp \int \sum_{\omega} d\mu(\omega)\, f(\chi),$$

dove la $f(\chi)$ coincide con quella già trovata alla Sezione 6.3.

Proof. Di nuovo dall'esponenziazione di questa espressione

$$\int \sum_{(\Omega_{ab})_{\mathrm{vSAW}}} d\mu(\Omega_{ab}) = \int \sum_{\Omega_{ab}} d\mu(\omega_{ab})\, f_{..}(\omega_{ab}) \prod_{\omega^\alpha} d\mu(\omega^\alpha)\, f(\omega^\alpha); \tag{6.43}$$

quindi, dalla fattorizzazione sulle porzioni connesse dei supporti, ritroviamo il sistema di equazioni (6.24) per le porzioni connesse C che non contengono estremi liberi, ed un nuovo sistema per le porzioni connesse $C_{..}$ che le contengono:

$$\forall C \qquad \prod dx_i \sum_{\Omega/\Omega|_s=C} \prod_{\omega^\alpha} f(\omega^\alpha) = \begin{cases} \prod dx_i & C = \omega_{vSAW} \\ 0 & C \neq \omega_{vSAW} \end{cases} \tag{6.44}$$

$$\forall C_{..} \qquad \prod dx_i \sum_{\Omega_{ab}/\Omega_{ab}|_s=C_{..}} f_{..}(\omega_{ab}) \prod_{\omega^\alpha} f(\omega^\alpha) = \begin{cases} \prod dx_i & C_{..} = (\omega_{ab})_{vSAW} \\ 0 & C_{..} \neq (\omega_{ab})_{vSAW} \end{cases} \tag{6.45}$$

Il sistema (6.44) è già stato risolto. Vediamo che è possibile risolvere induttivamente sull'ordine dei supporti anche il sistema (6.45). Il passo zero è

$$f_{..}((\omega_{ab})_{vSAW}) = 1 \tag{6.46}$$

In una equazione di ordine n, identificate le due terminazioni da trasporre, e raccolte in coppie le Ω_{ab} con $\Omega_{ab}|_s = C_{..}$, si potranno verificare i due casi:

1. una delle due configurazioni della coppia consiste di un solo cammino aperto. Va deciso il peso di quest'ultimo, che sarà determinato imponendo che sia l'opposto del peso dell'altro elemento della coppia, consistente in un cammino aperto ed uno chiuso.

2. nessuna delle due configurazioni della coppia consiste di un solo cammino. La porzione connessa alle due terminazioni su cui agisce la trasposizione potrà avere come supporto o un C di ordine più basso, ed aver fattorizzato fuori il peso di un $C_{..}$, o viceversa. In queste due situazioni ci si riconduce rispettivamente al caso 1 del sistema (6.44) o al caso 1 di questo sistema, per supporti di ordine più basso.

Di nuovo vale che il meccanismo di scelta delle terminazioni da trasporre è stabile per inclusione. Il teorema è quindi dimostrato. $\square$

Il teorema appena visto ci permette di scrivere

$$\langle p_a p_b \rangle = \int \sum_{\omega_{ab}} d\mu(\omega_{ab})\, f_{..}(\omega_{ab}), \tag{6.47}$$

o meglio, evidenziando la fattorizzazione del peso termodinamico su ciascuna classe,

$$\langle p_a p_b \rangle = \sum_{\chi_{..}} f_{..}(\chi_{..}) \sum_{\omega_{ab}/\chi_{..}(\omega_{ab})=\chi_{..}} \left(\prod d\mu(p_i^{(k)}, x_i^{(k)}, p_j^{(h)}, x_j^{(h)}) \right) \cdot \delta_{\mathrm{vSAW}}. \tag{6.48}$$

Come al paragrafo 6.4, modificheremo adesso i pesi topologici al fine di far venire meno la condizione δ_{vSAW} nella (6.48). La dimostrazione del fatto che ciò è possibile, ed il metodo per scrivere l'algoritmo, sono identici a quelli già visti, e non verranno riproposti. Scriveremo quindi

$$\langle p_a p_b \rangle = \sum_{\chi_{..}} g_{..}(\chi_{..}) \sum_{\omega_{ab}/\chi_{..}(\omega_{ab})=\chi_{..}} \prod d\mu(p_i^{(k)}, x_i^{(k)}, p_j^{(h)}, x_j^{(h)}). \tag{6.49}$$

Integrando sulle variabili ausiliarie, e sommando i fattori topologici di diagrammi cui corrisponde lo stesso peso termodinamico in fattori topologici efficaci $\bar{g}_{..}(\bar{\chi}_{..})$, abbiamo

$$\begin{aligned}
\langle p_a p_b \rangle &= \langle a\, b \rangle^{(0)} + \langle a\, b \rangle^{(1)} + \cdots ; \\
\langle a\, b \rangle^{(k)} &= \sum_{p_1 < \ldots < p_k \neq p_{a,b}} \sum_{\bar{\chi}_{..(k)}} \bar{g}_{..}(\bar{\chi}_{..})\; G(p_i, p_j)^{a_{ij}(\bar{\chi}_{..})} && (6.50) \\
&= \sum_{p_1 < \ldots < p_k \neq p_{a,b}} \Phi_{..}^{(k)}(G(p_i, p_j)); && (6.51)
\end{aligned}$$

dove i propagatori congiungono i punti p_a, p_b o quelli a pedice della sommatoria.

6.6 Procedimento per modelli bSAW.

Il modello appena studiato di cammini con condizione vSAW, nel caso di matrice M simmetrica, somiglia molto al problema di cammini bSAW originato da un modello di spin. L'unica differenza è che le configurazioni ammesse nel problema vSAW, riviste nell'ottica del problema bSAW, sono composte di cammini con condizione vSAW, di peso τ^L, e da una sorta di dimeri, di peso τ^2. Il metodo appena esposto per il problema vSAW è facilmente estendibile al problema bSAW, con l'unica complicazione di carattere tecnico che è necessario lavorare con la matrice di transfer espressa nella base dei bond orientati anzichè in quella dei punti al fine di implementare la condizione di cammino non backtracking (ricordiamo che per reticoli di coordinazione tre la condizione di essere bSAW può esser vista come il concorso della condizione vSAW e della condizione di essere non backtracking).

La cella elementare del semplice reticolo ipercubico in dimensione D è composta di un solo punto e di $2D$ bond orientati (e questo è il limite inferiore, come si vede facilmente). Segue che, anche una volta sfruttate al massimo le semplificazioni prodotte dal passare in trasformata di Fourier, mentre per il problema vSAW avevamo una funzione per il propagatore libero, per il problema bSAW avremo una scomoda matrice $2D \times 2D$ di funzioni, che fa proliferare terribilmente la casistica di diagrammi da sommare (di un fattore $\mathcal{O}\left((2D)^k\right)$ all'ordine k-imo).

Ciò nonostante riteniamo utile rivedere alcuni passaggi del procedimento anche nel caso bSAW. Le ragioni di questa scelta risiedono fondamentalmente nel fatto che tale modello è legato via l'espansione di alte temperature al più intuitivo modello di spin su reticolo, ed al fatto ad esso legato che il primo problema cooperativo di questo genere risolto in maniera esatta, ovvero il modello di Ising in due dimensioni, studiato al capitolo 4, è proprio un problema bSAW. Una ulteriore ragione sarà la nostra volontà di raffrontare questi risultati con quanto già ottenuto per mezzo della Linked Cluster Expansion. Discuteremo di questo alla sezione 7.4.

In analogia a quanto già fatto, sceglieremo un ordinamento sui bond del reticolo, ed assegneremo una variabile $x_i \in [0,1]$ ad ogni attraversamento di un bond (le cosiddette variabili "ausiliarie").

Un cammino chiuso generico ω può essere visto anche come un insieme ordinato di bond ad occupazione multipla $(\lambda_1, \cdots \lambda_k)$, con numeri di occupazione nei due versi rispettivamente $(m_1, m'_1, \cdots m_k, m'_k; m_i + m'_i \geq 2)$, ed archi di cammino a congiungere tra loro le $M = \sum(m_i + m'_i)$ terminazioni $(\lambda_1^{(1)}, \dots \lambda_1^{(m_1)}, \cdots\ \lambda_k^{(m'_k)})$. Tali archi di cammino saranno self-avoiding rispetto ai bond, in quanto abbiamo già esplicitato in $(\lambda_1, \cdots \lambda_k)$ tutti i bond attraversati più di una volta. Le sole informazioni costituite dalla stringa dei numeri di occupazione per i bond e dalla successione degli attraversamenti riassumono la "forma" del cammino, le sue caratteristiche topologiche, e determinano delle classi di equivalenza per l'insieme dei cammini, che chiameremo anche in questo caso *diagramma* associato ad un certo cammino, o $\chi(\omega)$.

Rianalizziamo quindi il teorema 6.3.1 sulle cancellazioni

Teorema 6.6.1.

$$\exists f : \{\chi\} \to \{-1, 0, +1\} \quad / \quad Z = \exp \int \sum_{\omega} d\mu(\omega)\ f(\chi(\omega)). \tag{6.52}$$

Proof. in maniera del tutto analoga a quanto già visto giungiamo a riscrivere le richieste della tesi attraverso un sistema di equazioni

$$\forall C \qquad \prod dx_i \sum_{\Omega/\Omega|_s=C} \prod_{\omega^\alpha} f(\omega^\alpha) = \begin{cases} \prod dx_i & C = \omega_{bSAW} \\ 0 & C \neq \omega_{bSAW} \end{cases} \tag{6.53}$$

La costruzione del sistema, infatti, non è influenzata dal tipo di ensemble che vogliamo ottenere se non nell'ultimo passaggio in cui si impongono i pesi che dovranno avere i vari supporti.

Ridefiniamo una nuova nozione di ordine secondo i numeri di occupazione dei bond:

$$\#(\omega) = \sum_{\langle ij \rangle} \frac{(n_{ij} + n'_{ij})(n_{ij} + n'_{ij} - 1)}{2}, \tag{6.54}$$

dove n_{ij}, n'_{ij} sono il numero di volte che il cammino ω attraversa il bond $\langle ij \rangle$ nei due versi. Con questa nuova definizione l'ordine di un cammino è zero se e solo se il cammino è bSAW. Quindi il passo zero del procedimento induttivo è:

$$f(\omega_{bSAW}) = 1 \tag{6.55}$$

Per il passo di induzione, in analogia a quanto già fatto, raccoglieremo in coppie i cammini che differiscono soltanto per la trasposizione della prima coppia di attraversamenti, con l'unica differenza che adesso gli attraversamenti dei bond sono possibili nei due versi. La casistica si comporrà quindi di tre casi:

1. una delle due configurazioni della coppia consiste di un solo cammino;
2. nessuna delle due configurazioni della coppia consiste di un solo cammino
3. entrambe le configurazioni consistono di un solo cammino.

Come prima, il primo caso è semplice. Il peso del cammino singolo va deciso. Esso rimane determinato dall'imposizione di essere l'opposto del peso dell'altro elemento nella coppia, composto da due cammini.

Il terzo caso, novità del procedimento, è altrettanto semplice, in quanto siamo liberi di dare ai due cammini i pesi che vogliamo, basta che siano opposti, inclusa la scelta che appare più ovvia, dare zero ad entrambi[4].

Il secondo caso, che ci poneva un problema di verifica, è soddisfatto anche per questo problema, in quanto nuovamente il procedimento di scelta delle terminazioni da trasporre è stabile per inclusione. □

Il resto del procedimento, che prevede il passaggio da archi di cammini self-avoiding ad archi di cammini liberi, e le medie dei pesi di cammini corrispondenti allo stesso monomio nelle variabili G_{ij}, è pressochè identico.

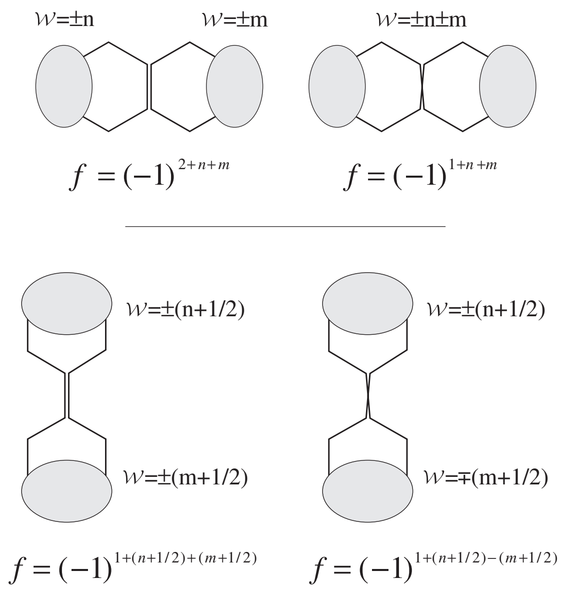
[4]Una rimarchevole eccezione è la soluzione esatta di Kac e Ward, per cui è più facile implementare il calcolo assegnando ai due cammini pesi opposti pari a ± 1.

6.7 Soluzione esatta per reticoli planari.

A questo punto vale forse la pena rianalizzare in maniera alternativa rispetto a quanto fatto alla sezione 4.4, ed alla luce della sezione precedente, le proprietà dei sistemi bidimensionali che permettono di ricondurre il peso appena trovato al winding number del cammino.

Cominciamo col notare che un cammino self-avoiding sul piano avrà sempre $\mathcal{W}_\omega = \pm 1$. Assegnando quindi il peso $f(\omega) = (-1)^{\mathcal{W}_\omega + 1}$ soddisfiamo il passo zero del procedimento d'induzione. Per verificare anche il passo induttivo dobbiamo verificare che in seguito al "twist" il winding number complessivo, più il numero di cammini, varia di un intero dispari. In virtù della definizione integrale del winding number possiamo definire lo stesso anche per archi aperti di cammino orientato. Un arco aperto che ha per estremi gli estremi opposti di un bond avrà $\mathcal{W}$ intero (in quanto può essere chiuso con un singolo tratto rettilineo, con $\mathcal{W}$ nullo). Un arco aperto che ha per estremi lo stesso estremo di un bond avrà $\mathcal{W}$ semiintero, (poichè può essere chiuso con una piccola semicirconferenza, di $\mathcal{W} = \pm\frac{1}{2}$), e quindi le sue due orientazioni avranno $\mathcal{W}$ che differiscono per un intero dispari. Da questo, e da quanto è mostrato in figura 6.5, si verifica anche il passo induttivo.

Figura 6.5: *Verifica del funzionamento dell'assegnazione del peso* $f(\omega) = (-1)^{\mathcal{W}_\omega + 1}$ *per sistemi bidimensionali.*



6.8 Ruolo dei dimeri per problemi vSAW nell'intorno della criticalità.

Abbiamo già notato come l'unica differenza fra l'ensemble dei vSAW e quello dei bSAW è che nel primo sono presenti anche configurazioni che contengono dei "dimeri", ovvero i cammini di due passi che si chiudono dopo aver percorso un bond nei due versi. Questi oggetti si aggiungono al gas di cammini, e come i cammini, sono anch'essi impenetrabili.

Vogliamo cercare di comprendere meglio il ruolo dei dimeri nell'ambito del problema vSAW, con particolare riguardo a cosa accade in prossimità della temperatura critica.

A tal fine presenteremo un argomento di tipo "Monte Carlo", ovvero faremo delle stime su come è fatto il nostro ensemble di configurazioni rilevanti nella statistica vicino alla temperatura critica, naturalmente lasciando libero il parametro che dà le percentuali relative di dimeri e cammini; quindi introdurremo delle "mosse elementari" che genereranno la camminata aleatoria nel nostro ensemble, facendo attenzione a non introdurre dei bias; infine, cercheremo il valore del rapporto fra numero di siti occupati da dimeri e numero di siti occupati da cammini a cui tendono i cammini Monte Carlo.

Pensiamo per semplicità al caso di reticolo ipercubico in dimensione generica D. Notiamo che la geometria del reticolo impone che tutti i cammini chiusi compiano un numero pari di passi. Una mossa elementare che permette di variare le percentuali di dimeri e cammini, senza cambiare l'energia della configurazione, è quella che porta un cammino in una delle due "catene di dimeri" poste sui bond da lui occupati (vedi figura 6.6)

Ai fini del buon funzionamento del metodo Monte Carlo, dovremo ammettere anche la mossa inversa, ovvero ricomporre un cammino a partire da una catena di dimeri. Inoltre, se pensiamo a cosa accade ad alte temperature, scopriamo che queste mosse non sono sufficienti: infatti un cammino isolato può spezzarsi in una catena di dimeri, e la catena di dimeri, viceversa, può ricomporre il cammino, ma configurazioni con dimeri isolati non riescono ad avviare una camminata Monte Carlo. Dobbiamo quindi aggiungere delle mosse che tengano conto della mobilità dei dimeri e dei cammini. La mossa più ovvia è quella che porta un dimero su un bond vicino, se l'altro estremo non è occupato.

Utilizziamo una approssimazione "di campo medio" per le probabilità di avere un sito su cui insista un dimero (prob.$=d$), o che sia attraversato da un cammino (prob.$=c$), od ancora che sia libero (prob.$=1-d-c$), trascurando le correlazioni fra siti vicini. Chiamiamo $G_0(2L)$ il numero di cammini chiusi di lunghezza $2L$ con condizione bSAW sul reticolo.

Per ogni configurazione avrò a disposizione un certo numero di mosse di "distruzione" per un cammino, dato approssimativamente da

$$N_{\text{distr.}} \simeq N \sum_L \frac{G_0(2L)c^L}{2L}; \tag{6.56}$$

e similmente un numero di mosse di "creazione"

$$N_{\text{creaz.}} \simeq N \sum_L \frac{G_0(2L)[(2D-1)d]^L}{2L}; \tag{6.57}$$

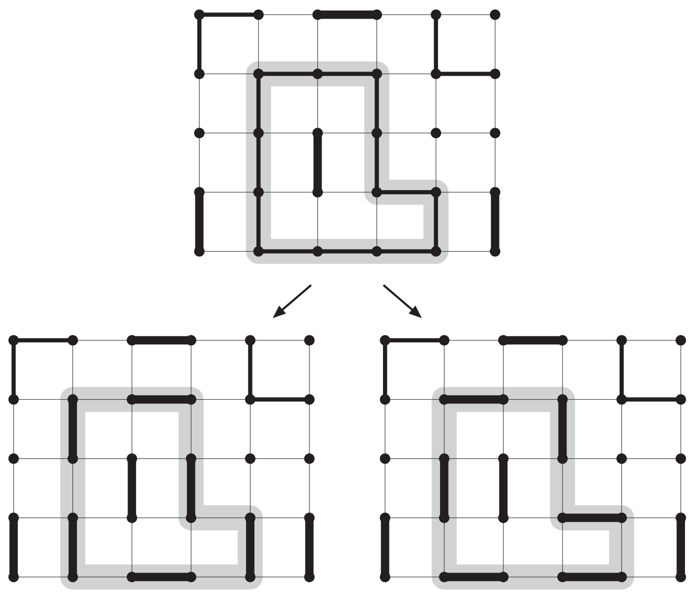
ed un numero di mosse che lasciano la situazione stabile

$$N_{\text{stab.}} \simeq N(2D-1)(1-d-c)d; \tag{6.58}$$

Nel nostro argomento trascureremo del tutto la mobilità dei cammini. Abbiamo visto che $d+c$ si conserva, ed agisce come una sorta di parametro di temperatura: tendente a zero per temperatura tendente ad infinito, raggiunge un valore critico strettamente compreso fra zero e uno alla temperatura di transizione. La percentuale media di bond che passano da dimeri a cammini sarà quindi data da

$$\frac{\Delta d}{d+c} \simeq \frac{\sum_L G_0(2L)[(2D-1)d]^L - 2\sum_L G_0(2L)c^L}{(2D-1)(1-d-c)d + \frac{G_0(2L)[(2D-1)d]^L}{2L} + \sum_L \frac{G_0(2L)c^L}{2L}} \tag{6.59}$$

Figura 6.6: *Prima mossa elementare: scomposizione di un cammino in una catena di dimeri.*



Noi sappiamo dalla teoria generale sui random walks che esiste un valore critico per l'argomento della funzione $F(x) = \sum_L G_0(2L)$ diverge. Ma nell'intorno della temperatura critica diverge la suscettività del nostro modello, e questo si traduce proprio in una divergenza della quantità delle mosse Monte Carlo possibili (il sistema è molto "mobile", come dimostra il fatto che presenta fluttuazioni a lungo range) e quindi possiamo ritenere che in prossimità della temperatura critica si abbia come valore stazionario per la percentuale di dimeri

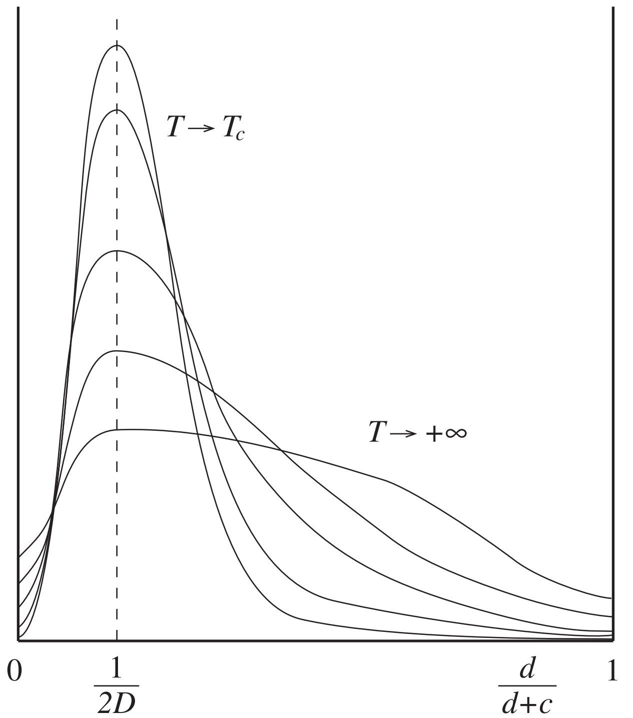
$$\left.\frac{d}{d+c}\right|_{T\to T_c} = \frac{1}{2D}; \tag{6.60}$$

e che la distribuzione sia molto piccata intorno a tale valore.

Per alte temperature, invece, possiamo stimare la $F(x)$ con il suo primo termine di sviluppo. Questo porta ad un valore stazionario non molto dissimile rispetto al precedente

$$\left.\frac{d}{d+c}\right|_{T\to +\infty} = \sqrt{2}\frac{1}{2D}; \tag{6.61}$$

Figura 6.7: *Distribuzione di probabilità per* $\frac{d}{d+c}$ *al variare della "temperatura"* $d+c$.



Adesso la distribuzione è molto più ampia, e soprattutto è molto biasata verso presenze massicce di dimeri per via della presenza del termine di mobilità a denominatore. Uno *schetch* di questo andamento è mostrato in figura 6.7.

In conclusione, da quanto visto risulta che la presenza dei dimeri non è percentualmente elevata vicino alla temperatura critica, e diventa invece preponderante nella regione (poco interessante, invero) di alte temperature.

Capitolo 7

Calcolo dei coefficienti topologici.

Abbiamo già osservato più volte come i coefficienti topologici che compaiono nel calcolo dell'energia libera, cioè i $\bar{g}(\bar{\chi})$, ottenuti al capitolo 6 come risultato di un lungo algoritmo che prevede svariate ricorsioni e medie, siano indipendeneti dal reticolo Λ che descrive il modello in questione.

Questa sorta di "universalità" dei coefficienti topologici ci porta ad escogitare uno stratagemma per aggirare il complesso calcolo combinatorio descritto al capitolo 6. L'idea è di calcolare questi coefficienti semplicemente imponendo che lo sviluppo in serie descritto da essi coincida con quello eseguito sul risultato esatto, nel caso di sistemi particolarmente semplici.

Un simile procedimento non garantirebbe in linea di principio il calcolo esatto di questi coefficienti: le condizioni imposte dalla coincidenza delle due serie potrebbero essere insufficienti per determinarli in maniera univoca, e potrebbero procurarci soltanto delle regole di somma. Per fortuna (ed in maniera abbastanza sorprendente) esistono sistemi per cui questo procedimento fornisce un risultato univoco, espresso in termini delle funzioni generatrici $\Phi^{(k)}$ già introdotte al capitolo 6.

Da questo dedurremo che lo sviluppo eseguito al capitolo precedente, seppure sembri celare un grande numero di arbitrarietà, al termine delle operazioni di media conduce in realtà all'unico sviluppo possibile di quella forma.

È proprio questa preziosa proprietà di unicità che ci permette, in chiusura di capitolo, di mettere in relazione i nostri risultati con i risultati classici della Linked Cluster Expansion.

7.1 Reticoli completi a k punti.

I sistemi che studieremo in questo capitolo, e che ci permetteranno di ottenere tali funzioni, sono i sistemi di vSAW sui reticoli completi a k punti $\Lambda^{(k)}$.

Per questi reticoli la funzione che definisce l'energia dei bond, $l_\beta(p_i, p_j)$, è la più generica matrice di transfer $k \times k$, che indicheremo con M_{ij}. La matrice del propagatore libero G_{ij} discende dalla relazione:

$$G_{ij} = \sum_{L=1}^{+\infty} (M_{ij})^L; \tag{7.1}$$

Assumendo che tutti gli autovalori di M abbiano modulo minore di 1, e risommando formalmente la serie geometrica, potremo scrivere la (7.1) come

$$I + G = (I - M)^{-1}. \tag{7.2}$$

Ricordiamo che noi vogliamo trovare per la funzione di partizione del modello di self-avoiding random walk uno sviluppo del tipo

$$\begin{aligned} Z &= Z^0 \cdot \exp[F^{(1)} + F^{(2)} + \cdots]; && (7.3) \\ F^{(k)} &= \sum_{p_1 < \ldots < p_k} \Phi^{(k)}(G(p_i, p_j)), && (7.4) \end{aligned}$$

dove nei monomi che entrano nello sviluppo in serie di $\Phi^{(k)}$ debbono comparire a pedice tutti i punti $(p_1, \ldots p_k)$ per l'osservazione a pagina 80; quindi, se vogliamo trovare le $\Phi^{(k)}(G_{ij})$, dobbiamo prima calcolare esattamente $Z(G_{ij})$ e $Z^0(G_{ij})$.

La funzione di partizione Z è pari alla somma su tutte le configurazioni di cammini vSAW del prodotto delle M_{ij} corrispondenti a bond attraversati. La condizione in questione impone che, data l'espressione del peso per una configurazione ammessa, per ciascun indice h vi sia esattamente un termine del tipo M_{ih} ed esattamente uno del tipo M_{hj} (eventualmente lo stesso), oppure nessun termine che abbia a pedice h. Questa espressione è identica al permanente[1] della matrice $I + M$. Abbiamo quindi

$$Z = \mathrm{per}(I + M) = \mathrm{per}(2I - (I + G)^{-1}). \tag{7.5}$$

La definizione di Z^0 è

$$Z^0 = \exp \sum_{\omega} \mu(\omega), \tag{7.6}$$

ovvero, chiamando ω° i cammini chiusi "puntati", e ω_L i cammini chiusi di lunghezza L,

$$\begin{aligned} \ln Z^0 &= \sum_{L=1}^{+\infty} \sum_{\omega_L} \mu(\omega) = \sum_{L=1}^{+\infty} \sum_{\omega_L^\circ} \frac{\mu(\omega^\circ)}{L} && (7.7) \\ &= \sum_{L=1}^{+\infty} \frac{\mathrm{tr} M^L}{L} = -\mathrm{tr}\,(\ln(I - M)) && (7.8) \\ &= -\ln\det(I - M) = \ln\det(I + G). && (7.9) \end{aligned}$$

[1]Il permanente è definito (per matrici generiche) come per $A = \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{2m}} \prod_{i=1}^{2m} A_{i\sigma_i}$.

Da cui, combinando le (7.3), (7.5) e (7.9), otteniamo

$$\begin{aligned} Q^{(k)}(G) &= \ln[\mathrm{per}(I+M(G))\cdot\det(I-M(G))] && (7.10)\\ &= \ln\frac{\mathrm{per}(2I-(I+G)^{-1})}{\det(I+G)}; && (7.11)\\ &= [F^{(1)}+F^{(2)}+\cdots F^{(k)}]_{\Lambda^k} && (7.12)\end{aligned}$$

(la serie si ferma al termine k-mo poichè il peso termodinamico dei termini superiori, contando le configurazioni con più di k punti distinti su un reticolo di soli k punti, è nullo).

La funzione $Q^{(k)}$ ha un unico sviluppo in serie di Taylor in termini di G_{ij}. Ricordando dalla (7.4) che

$$F^{(h)}|_{\Lambda^k} = \sum_{\alpha_1<\ldots\alpha_h\le k} \Phi^{(h)}(G_{\alpha_i,\alpha_j}), \tag{7.13}$$

troviamo in particolar modo che tutti e soli i monomi dello sviluppo di Taylor di $Q^{(k)}$ nei quali compaiano a pedice tutti i punti da 1 a k confluiranno in $\Phi^{(k)}$[2]. Da qui otteniamo subito un importante risultato: a ciascun ordine k, se esiste uno sviluppo del tipo (7.3) per il reticolo $\Lambda^{(k)}$, esso è unico. Combinando questo risultato con quanto trovato al capitolo 6, per cui esiste a tutti gli ordini almeno uno sviluppo del tipo (7.3), valido per tutti i reticoli, possiamo concludere che un tale sviluppo esiste a tutti gli ordini, è unico, e valido per tutti i reticoli, e può essere ottenuto sia con l'algoritmo combinatorio del capitolo 6, sia col metodo appena esposto, e che adesso ci accingiamo a raffinare.

Utilizziamo immediatamente tutte le preziose informazioni che ci giungono dalla scoperta appena fatta:

- le $\Phi^{(h)}$ da sottrarre a $Q^{(k)}$ per ottenere $\Phi^{(k)}$ nel caso del reticolo $\Lambda^{(k)}$ sono identiche a quelle che avremo già trovato per via induttiva per i vari $\Lambda^{(h)}$;

- i monomi che appaiono in ciascuna $\Phi^{(h)}$ corrispondono soltanto a diagrammi connessi.

Da queste scopriamo che tutti i monomi corrispondono a diagrammi connessi, che quelli ad h punti, che attraversano i punti $(\alpha_1,\ldots\alpha_h)$, compaiono in tutte e sole le funzioni $Q^{(k)}$ che contengano $(\alpha_1,\ldots\alpha_h)$, e sempre con lo stesso coefficiente. È facile combinatoria il fatto che su Λ_k il numero di stringhe di punti $(\alpha_1,\ldots\alpha_h)$ che contengono la stringa $(\beta_1,\ldots\beta_l)$ è $\binom{k-l}{k-h}$,

[2] Questo sempre per l'osservazione a pagina 80.

da cui, ricordando che $\sum \binom{k}{h}(-1)^h = 0$ a meno che k non sia zero, si verifica l'esattezza della formula

$$\Phi^{(k)} = \sum_h (-1)^{k-h} \sum_{\alpha_1 < \ldots \alpha_h \leq k} Q^{(h)}(G_{\alpha_i,\alpha_j}). \tag{7.14}$$

Riceviamo infine senza fatica una informazione che difficilmente avremmo saputo dedurre al capitolo 6: diagrammi che differiscono per una permutazione dei punti che li costituiscono hanno pesi uguali, come consegue dalla manifesta simmetria della formula trovata.

7.2 Funzioni generatrici per il calcolo della funzione di correlazione a due punti.

Al capitolo 6 abbiamo trovato non solo uno sviluppo in serie per l'energia libera, ma anche uno per la funzione di correlazione a due punti. I procedimenti utilizzati sono pressochè identici, sarà quindi lecito aspettarsi che, se i ragionamenti di questo capitolo hanno portato buoni frutti per la serie dell'energia libera, li porteranno anche per la serie della funzione di correlazione.

Soffermiamici sui reticoli completi a $k+2$ punti, e chiamiamo i punti $(a, b, 1, \ldots k)$ anzichè $(1, 2, \ldots k+2)$. Calcoliamo la funzione di correlazione fra i punti a e b:

$$\langle a\, b \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{(\Omega_{ab})_{\mathrm{SAP}}} \mu(\Omega_{ab}). \tag{7.15}$$

La funzione di partizione è già stata calcolata alla (7.5), e vale

$$Z = \mathrm{per}(I + M); \tag{7.16}$$

quanto al resto dell'espressione, nel peso corrispondente ad una configurazione che compare in essa, per ciascun punto $h \neq a, b$ comparirà esattamente un termine del tipo M_{ih} ed esattamente uno del tipo M_{hj} (eventualmente lo stesso), oppure nessun termine che abbia a pedice h, mentre per i punti a e b compariranno rispettivamente soltanto un termine del tipo M_{ai} ed uno del tipo M_{jb}. Questa espressione è identica al permanente della matrice $I + M$, derivato rispetto a M_{ba}. Abbiamo quindi

$$\langle a\, b \rangle = \frac{\partial_{M_{ba}} \mathrm{per}(I + M)}{\mathrm{per}(I + M)} = \frac{\partial}{\partial M_{ba}} \ln \mathrm{per}(I + M). \tag{7.17}$$

Ricordando che $M = M(G)$, potremmo chiamare la funzione appena trovata $Q_{..}(G_{ij})$, e, ripetendo i ragionamenti di inclusione-esclusione del paragrafo precedente, troveremmo

$$\Phi^{(k)}_{..}(G_{ij}) = \sum_h (-1)^{k-h} \sum_{\alpha_1<\ldots\alpha_h\le k} Q^{(h)}_{..}(G_{\alpha_i,\alpha_j}); \tag{7.18}$$

$$Q^{(k)}_{..}(G) = \frac{\partial}{\partial M_{ba}} \ln \mathrm{per}(I+M); \tag{7.19}$$

$$M = I - (I+G)^{-1}; \tag{7.20}$$

7.3 Compendio delle formule trovate.

Forse questo è un buon punto per riassumere in un unico schema i risultati fin qui trovati:

$$\begin{aligned}
Z(\Lambda,\beta) &= Z^0(\Lambda,\beta)\cdot \exp[F^{(1)}+F^{(2)}+\cdots]_{\Lambda,\beta}; && \text{(7.21a)}\\
F^{(k)}|_{\Lambda,\beta} &= \frac{1}{k!}\sum_{p_1\neq\ldots\neq p_k\in\Lambda} \Phi^{(k)}(G_\beta(p_i,p_j)); && \text{(7.21b)}\\
\Phi^{(k)}(G_{ij}) &= \sum_h (-1)^{k-h} \sum_{\alpha_1<\ldots\alpha_h\le k} Q^{(h)}(G_{\alpha_i,\alpha_j}); && \text{(7.21c)}\\
Q^{(k)}(G) &= \ln(\mathrm{per}(I+M)\det(I-M)); && \text{(7.21d)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle p_a p_b\rangle &= \langle a\,b\rangle^{(0)} + \langle a\,b\rangle^{(1)} + \cdots; && \text{(7.21e)}\\
\langle a\,b\rangle^{(k)} &= \sum_{p_1<\ldots<p_k\neq p_{a,b}} \Phi^{(k)}_{..}(G(p_i,p_j)); && \text{(7.21f)}\\
\Phi^{(k)}_{..}(G_{ij}) &= \sum_h (-1)^{k-h} \sum_{\alpha_1<\ldots\alpha_h\le k} Q^{(h)}_{..}(G_{\alpha_i,\alpha_j}); && \text{(7.21g)}\\
Q^{(k)}_{..}(G) &= \frac{\partial}{\partial M_{ba}} \ln \mathrm{per}(I+M); && \text{(7.21h)}\\
M &= I-(I+G)^{-1}; && \text{(7.21i)}
\end{aligned}$$

7.4 Random Walks ed LCE.

Riconsideriamo l'espressione per l'energia libera nel modello di Ising, trovata al capitolo 3 per mezzo della Linked Cluster Expansion non rinormalizzata (cfr. le formule 3.11, 3.13).

$$F = \sum_{\mathcal{G}\in\mathcal{T}^{(r,0)}} \frac{V_0^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G})K^{e(\mathcal{G})}E(\mathcal{G})}{S(\mathcal{G})} \tag{7.22}$$

dove abbiamo

$$V_0^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G}) = \prod_{i=1}^{v} \mu_{0I}(n(i)); \tag{7.23}$$

$$\ln\cosh h = \frac{1}{2!}h^2 + \frac{-\frac{1}{2}}{4!}h^4 + \frac{\frac{1}{4}}{6!}h^6 + \cdots = \frac{1}{2!}h^2 + \sum_{n=2}^{+\infty} \frac{\mu_{0I}(2n)}{(2n)!}h^{2n}; \tag{7.24}$$

$$E(\mathcal{G}) = \#\{\text{free embeddings del grafo } \mathcal{G} \text{ sul reticolo}\}; \tag{7.25}$$

Anzichè immaginare che i termini dello sviluppo siano dei grafi astratti, pesati, fra gli altri fattori, con il numero di modi $E(\mathcal{G})$ in cui essi si possono immergere sul reticolo, possiamo pensare che i termini dello sviluppo siano proprio queste realizzazioni, e che il peso ad esse assegnato dipende soltanto dalla loro rappresentazione come grafo astratto.

$$F = \sum_{\mathcal{G} \in \mathcal{T}^{(r,0)}} \sum_{\mathcal{E}(\mathcal{G})} \frac{V_0^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G}) K^{e(\mathcal{G})}}{S(\mathcal{G})} \tag{7.26}$$

Il fattore di vertice interno ci dice che le uniche classi di grafi ammesse sono quelle con coordinazione pari su ogni vertice. Un grafo sarà composto in generale da k vertici con coordinazione maggiore di due, e da archi, con al loro interno soltanto (eventualmente) vertici di coordinazione due, a congiungere le terminazioni dei vertici. L'espressione per il fattore di vertice interno ci dice che il peso assegnato a grafi che differiscono soltanto per la lunghezza di questi archi di cammino è identico, a meno del fattore termodinamico K^e. Possiamo quindi compiere una rinormalizzazione di linea (molto più banale di quella discussa al capitolo 3) riportando tali archi al propagatore libero del sistema. Con questa rinormalizzazione un $\mathcal{G}'$ è un grafo appartenente alla classe precedente, con in più la restrizione di non avere vertici a coordinazione due, ed un $\mathcal{E}(\mathcal{G}')$ è una assegnazione di k punti del reticolo (non necessariamente distinti) ai k vertici a coordinazione maggiore di due di $\mathcal{G}'$, ovvero $\mathcal{E}(\mathcal{G}') = (p_1(\mathcal{E}), \cdots, p_k(\mathcal{E}))$. Avremo così

$$F = \sum_{\mathcal{G}'} \sum_{\mathcal{E}(\mathcal{G}')} \frac{V_0^{(\mathrm{i})}(\mathcal{G}')}{S(\mathcal{G}')} \prod G(p_i(\mathcal{E}), p_j(\mathcal{E}))^{n_{ij}(\mathcal{G})} \tag{7.27}$$

dove ciascun $n_{ij}(\mathcal{G})$ è il numero di bond del grafo che congiungono i vertici i e j.

Questa espressione somiglia notevolmente alla nostra (6.39). Vi sono però alcune differenze:

- la serie da noi derivata esplicitamente è quella per il modello vSAW, che non può essere ricondotto al modello di Ising. In realtà dovremmo considerare l'analoga serie ottenibile seguendo il procedimento esposto alla sezione 6.6 per modelli bSAW. Questo non è un problema, infatti questo secondo procedimento si può portare a termine, e produce un risultato uguale in forma alla (6.39);

- i nostri termini della serie sono diagrammi costruiti a partire da punti del reticolo distinti, mentre per i diagrammi della LCE vale ancora la condizione di free embedding. Anche questo non è un problema: è facile passare da un insieme ad un altro con un procedimento di inclusione-esclusione;

- il modello di Ising è pressochè l'unico punto di contatto fra le due serie. La LCE si può estendere facilmente a lagrangiane locali differenti, ovvero ad una scelta qualunque di semi-invarianti, che debba rispettare soltanto delle proprietà di convergenza, mentre l'estensione ad interazioni non fra primi vicini appare macchinosa; al contrario il nostro metodo permette di scegliere con grande libertà range e forma dell'interazione (basta modificare l'espressione per il propagatore libero nella formula finale), ma è stato costruito a partire dall'espansione di alte temperature per modelli di spin, ed è difficilmente generalizzabile a lagrangiane locali differenti. Torneremo in seguito su questo aspetto;

- le due serie, anche in seguito alle correzioni dei primi due punti, e dopo esserci ristretti ai casi discussi al terzo punto, utilizzano come parametro di sviluppo due quantità diverse: la LCE utilizza il numero di bond occupati da un grafo, mentre il nostro metodo utilizza il numero di vertici a coordinazione maggiore di due. Questi due parametri, comunque, sono strettamente legati; infatti le troncate della serie in un parametro riproducono fino ad un certo ordine le troncate della serie nell'altro parametro. Inoltre è importante notare che il nostro parametro di sviluppo può essere introdotto nella serie della LCE, con un metodo che andiamo ad analizzare.

Calcoliamo la serie della LCE per una certa classe a un parametro di lagrangiane locali $\mathcal{L}_\theta$, con $\theta \in [0,1]$, definite mediante l'assegnazione dei semi-invarianti semplici associati:

$$\mu_{0\theta}(2) = 1; \qquad \mu_{0\theta}(2n) = \theta \cdot \mu_{0I}(2n) \quad \text{per } n \geq 2; \tag{7.28}$$

che riproducono per $\theta = 0$ il modello gaussiano e per $\theta = 1$ il modello di Ising. La trasformata di Laplace delle distribuzioni di probabilità a cui esse danno origine è

$$\int d\varphi\, e^{\mathcal{L}_\theta(\varphi)}\, e^{h\varphi} = e^{(1-\theta)\frac{h^2}{2}} (\cosh h)^\theta; \tag{7.29}$$

Si vede allora che il fattore di vertice interno porta una potenza θ^k per grafi con k vertici di coordinazione maggiore di due. La nostra serie ci dice quindi che le nostre quantità $\Phi_{(k)}$ sono pari alla parte della serie LCE di ordine θ^k, risommata in K. Ricordiamo che queste quantità, per ogni k finito, consistono in un integrale, su $k-1$ volte lo spazio euclideo $\mathbb{R}^D$, del logaritmo di una funzione razionale fratta (espressa in termini di funzioni elementari, quali determinanti e permanenti di matrici finito-dimensionali) di una funzione ben precisa e nota che caratterizza il modello. Per quanto complesso tale termine possa sembrare, è comunque probabilmente preferibile rispetto ad una somma su una certa famiglia di grafi, che si sanno soltanto enumerare algoritmicamente. Possiamo così sperare di estrarre delle informazioni esatte su alcuni andamenti asintotici della serie.

Un'altra osservazione che ritengo utile è che forse è possibile trarre spunto dalla somiglianza delle due serie nel caso del modello di Ising per estendere ciascuna ai problemi per cui è più adatta l'altra.

Suggerisco per la LCE di fare precedere il meccanismo tradizionale per le rinormalizzazioni di vertice e di linea dal procedimento descritto sopra per una semplice rimozione dei vertici di coordinazione due. Questo procedimento permette di introdurre il propagatore libero per il modello nel corpo dell'espansione, mentre il suo ruolo è solitamente nascosto dall'esecuzione simultanea delle altre rinormalizzazioni. A questo punto, riconosciuta la presenza del propagatore libero, vi si può sostituire quello relativo ad un termine di interazione arbitrario a corto range sul reticolo, e quindi eseguire le ulteriori rinormalizzazioni.

Analogamente, per il nostro sviluppo in serie, potremmo provare a dimostrare che le funzioni generatrici per il sistema con una lagrangiana locale arbitraria (ma regolare) sono semplicemente quelle derivanti dallo studio esatto dei sistemi completi a k punti con quella particolare lagrangiana locale.

Capitolo 8

L'altra faccia della medaglia: la DLR balistica.

Al capitolo 7 abbiamo trovato uno sviluppo in serie per l'energia libera per problemi di self-avoiding one-way random walk su reticolo generico. Tale sviluppo è dominato dallo sviluppo nel parametro di interazione, τ, nel senso che il termine k-imo dello sviluppo è una funzione complessa del parametro, regolare in un ampio intervallo di temperature (da infinito fino alla temperatura critica del problema libero), di ordine $2k$.

In questo capitolo dapprima riformuleremo tali risultati, in modo da reinterpretarli come uno sviluppo in serie di Taylor intorno a zero in un nuovo parametro, θ, che interpola la soluzione nota del problema libero, ottenuta per $\theta = 0$, in quella cercata del problema self-avoiding, ottenuta per $\theta = 1$.

Quindi eseguiremo un nuovo sviluppo, questa volta intorno a uno, per differenza a partire dal risultato incognito, con l'intento di raccordare i due sviluppi sui valori intermedi del parametro θ. Questo abbassa le richieste sul raggio di analiticità della funzione, oltre a restringere di molto l'errore nel caso di serie troncate calcolate al computer.

Questo sviluppo è espresso anche in termini di complesse funzioni di correlazione. Tali quantità, però, sono riconducibili a funzioni di correlazione più semplici per mezzo di equazioni del tipo DLR, in seguito ad un procedimento le cui linee generali sono illustrate nel corpo del capitolo.

Nell'equazione DLR tradizionale le quantità incognite vengono sostituite dalle loro approssimazioni fattorizzate. Nel nostro sviluppo, invece, esse vengono corrette sulla base del miglior raccordo con lo sviluppo intorno al problema libero.

Per questa ragione abbiamo pensato di chiamare questo metodo *DLR balistica.*

In chiusura di capitolo osserviamo come la riscrittura della nostra serie fornisce delle inaspettate informazioni su una certa classe di sistemi disordinati. In particolare, si trova non perturbativamente, all'interno dello spazio delle fasi per sistemi di spin con disordine quenched locale (operatore rilevante in $D = 3$, via criterio di Harris), un sottospazio in cui la coordinata relativa all'operatore del disordine è identicamente nulla.

8.1 Una riformulazione dei risultati ottenuti.

Abbiamo visto al capitolo 7 come, dato un reticolo Λ, definito da un insieme di N punti e da una matrice "delle adiacenze" o "propagatore ad un passo" M_{ij}, che associa alla coppia di entrate (i, j) l'ampiezza per fare un passo dal punto i al punto j, è possibile trattare i due problemi di gas di cammini orientati, self-avoiding oppure liberi, sul reticolo, con funzioni di partizione rispettivamente Z e Z_0, pari a

$$Z = \text{per}(I + M); \tag{8.1}$$

$$Z_0 = \det(I - M); \tag{8.2}$$

Abbiamo anche definito la matrice dei propagatori liberi come quella che associa alle entrate (i, j) la somma su tutti i cammini di lunghezza generica (non nulla) dell'ampiezza associata a ciascuno di essi, quindi

$$G = M + M^2 + M^3 + \cdots \tag{8.3}$$

o meglio,

$$I + G = (I - M)^{-1} \tag{8.4}$$

Abbiamo quindi

$$F - F_0 = \ln\left(\text{per}(I + M)\det(I - M)\right) = \ln\frac{\text{per}(2I - (I + G)^{-1})}{\det(I + G)} \tag{8.5}$$

È interessante considerare la seguente funzione del parametro θ, oltre che del parametro di interazione τ [1]:

$$\begin{aligned} f(\theta, \tau) &= F_0(\tau) + \sum_{\{\alpha\}\subseteq\{1,\dots N\}} \theta^{|\alpha|}(1-\theta)^{N-|\alpha|} \ln\frac{\text{per}(2I - (I + G|_{\{\alpha\}})^{-1})}{\det(I + G|_{\{\alpha\}})} \\ &= F_0(\tau) + \sum_{\{\alpha\}\subseteq\{1,\dots N\}} \theta^{|\alpha|}(1-\theta)^{N-|\alpha|} Q^{\{\alpha\}} \end{aligned} \tag{8.6}$$

la quale restituisce F_0 per $\theta = 0$, e F per $\theta = 1$. Quindi, per i valori del parametro di temperatura per cui la funzione sia analitica in un intorno di

[1] con $G|_{\{\alpha\}}$ si intende la matrice G, espressa nella base dei punti del reticolo, ristretta al sottospazio dei soli punti appartenenti ad $\{\alpha\}$

raggio uno di $\theta = 0$, lo sviluppo in serie di Taylor intorno allo zero, calcolato in uno, restituisce la funzione desiderata. Dopo breve algebra scopriamo, però, che tale sviluppo in serie è proprio il nostro sviluppo in serie. Infatti avevamo alla sezione 7.3, tra le altre

$$\begin{aligned} Z(\Lambda,\beta) &= Z^0(\Lambda,\beta)\cdot e^{(F^{(1)}+F^{(2)}+\cdots)_{\Lambda,\beta}}; && (8.7)\\ F^{(k)} &= \frac{1}{k!}\sum_{p_1\neq\ldots\neq p_k\in\Lambda}\Phi^{(k)}(G_\beta(p_i,p_j)) && (8.8)\\ &= \sum_{p_1<\ldots<p_k\in\Lambda}\Phi^{(k)}(G_\beta(p_i,p_j)) && (8.9)\\ \Phi^{(k)}(G_{ij}) &= \sum_h(-1)^{k-h}\sum_{\alpha_1<\ldots\alpha_h\le k}Q^{(h)}(G_{\alpha_i,\alpha_j}); && (8.10)\end{aligned}$$

Quindi per l'energia libera

$$\begin{aligned} F &= F_0+\sum_{k=0}^N\sum_{p_1<\ldots<p_k\in\Lambda}\Phi(p_1,\ldots p_k)\\ &= F_0+\sum_{k=0}^N\sum_{p_1<\ldots<p_k\in\Lambda}\sum_{h=0}^k(-1)^{k-h}\sum_{\alpha_1<\ldots\alpha_h\le k}Q^{(h)}(G_{\alpha_i,\alpha_j})\end{aligned} \tag{8.11}$$

Introduciamo adesso il parametro θ, scrivendo

$$\begin{aligned} f(\theta) &= F_0+\sum_{k=0}^N\theta^k\sum_{p_1<\ldots<p_k\in\Lambda}\Phi(p_1,\ldots p_k)\\ &= F_0+\sum_{k=0}^N\theta^k\sum_{p_1<\ldots<p_k\in\Lambda}\sum_{h=0}^k(-1)^{k-h}\sum_{\alpha_1<\ldots\alpha_h\in\{p_1,\ldots p_k\}}Q^{(h)}(G_{\alpha_i,\alpha_j})\\ &= F_0+\sum_{h=0}^N\sum_{\{\alpha_1,\ldots\alpha_h\}\subseteq\{1,\ldots N\}}\left(\sum_{(k-h)=0}^{N-h}(-\theta)^{k-h}\binom{N-h}{k-h}\right)\theta^hQ^{(h)}(G_{\alpha_i,\alpha_j})\\ &= F_0+\sum_{\{\alpha\}\subseteq\{1,\ldots N\}}\theta^{|\alpha|}(1-\theta)^{N-|\alpha|}Q^{\{\alpha\}}\end{aligned} \tag{8.12}$$

Al fine di studiare l'analicità della nostra funzione, è importante riconoscere che i coefficienti dello sviluppo in serie di Taylor sono strettamente legati alle nostre funzioni $\Phi(p_1,\ldots p_k)$,

$$\begin{aligned} f(\theta,\tau) &= F_0(\tau)+\sum_{k\ge1}C_k(\tau)\theta^k\\ C_k(\tau) &= \sum_{p_1<\ldots<p_k\in\Lambda}\Phi(p_1,\ldots p_k)=\mathcal{O}(\tau^{2k})\end{aligned} \tag{8.13}$$

Otteniamo così, dalla conoscenza dell'andamento in τ delle $\Phi^{(k)}$, la preziosa informazione che le troncate ad ordine k dello sviluppo di Taylor rispetto a θ in zero, ulteriormente sviluppate in τ, coincidono con il semplice sviluppo nel parametro τ fino all'ordine $2k$. Rispetto al semplice sviluppo, però, noi abbiamo in più il fatto che i vari termini dello sviluppo di Taylor sono espressi "in quadratura", come somme (o integrali, per modelli continui) sul volume di una funzione dei propagatori liberi $G(x_i, x_j)$, la cui espressione è solitamente nota, e non uno sviluppo diagrammatico, in termini di grafi che in generale non si sanno enumerare in formula chiusa.

Dopo questa breve riformulazione dei risultati dei capitoli precedenti, utilizziamo il nuovo punto di vista acquisito per proporre un ulteriore approccio al problema.

8.2 Un nuovo sviluppo in serie.

Come anticipato nell'introduzione al capitolo, eseguiremo un nuovo sviluppo, questa volta intorno a $\theta = 1^-$, per differenza a partire dal risultato incognito $f(\theta = 1, \tau)$.

Al fine di rendere più chiari i termini dello sviluppo, preferiremo lavorare con variabili leggermente ridefinite:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= F_0 + \sum_{\{\alpha\}\subseteq\Lambda} \theta^{|\alpha|}(1-\theta)^{N-|\alpha|} Q^{\{\alpha\}} \\ &= F_0 + \sum_{\{\alpha\}\subseteq\Lambda} \overline{\theta}^{|\alpha|}(1-\overline{\theta})^{N-|\alpha|} Q^{\Lambda\setminus\{\alpha\}}; \end{aligned} \tag{8.14}$$

$$\overline{\theta} = 1 - \theta; \tag{8.15}$$

I primi termini dello sviluppo sono le quantità $Q^{\{\alpha\}}$ per $1 - |\alpha|/N \to 0^+$. Queste non sono facili da trattare come nel precedente caso di $|\alpha|$ non macroscopico, tanto che, anzichè studiare i complessi permanenti e determinanti di matrici così grosse, preferiremo ricominciare dalle definizioni di Z e Z_0 come somma sulle configurazioni di cammini self-avoiding o liberi sul reticolo.

Ripensando alla definizione di $Q^{\{\alpha\}}$, scopriamo che esso è pari alla differenza fra le energie libere dei problemi self-avoiding e libero, per un reticolo che abbia come matrice dei propagatori liberi la matrice $G|_{\{\alpha\}}$, ovvero la matrice G associata al reticolo iniziale, ristretta ai soli punti in $\{\alpha\}$.

La nostra tradizionale visualizzazione di un reticolo, però, passa attraverso la matrice M; dobbiamo quindi trovare una nuova matrice $M^{\text{eff.}}_{\{\alpha\}}$ tale che

$$I - M^{\text{eff.}}_{\{\alpha\}} = (I + G|_{\{\alpha\}})^{-1} \tag{8.16}$$

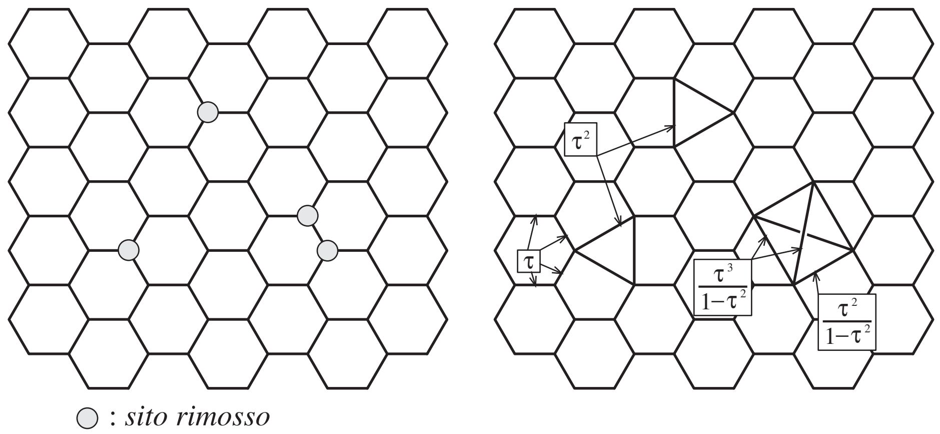
Si trova che

$$M^{\text{eff.}}_{\{\alpha\}ij} = \sum_{k=0}^{+\infty} \sum_{\{l_1,\cdots l_k\}\in\Lambda\smallsetminus\{\alpha\}} M_{il_1}M_{l_1l_2}\cdots M_{l_kj}; \qquad i,j\in\{\alpha\} \tag{8.17}$$

Operativamente, l'ampiezza originaria viene corretta aggiungendo la somma delle ampiezze corrispondenti a cammini dove tutti i passi intermedi avvengono su punti esclusi.

La visualizzazione del nuovo reticolo originato dopo la rimozione è mostrata con un esempio alla figura 8.1.

Figura 8.1: *Rappresentazione in termini di $M^{\text{eff.}}_{\{\alpha\}}$ del reticolo originato dalla rimozione dei siti in $\{\alpha\}$, in un esempio per reticolo esagonale.*



Per quanto visto sulla $M^{\text{eff.}}_{\{\alpha\}}$, scopriamo che ciascuna configurazione ammessa per $Z_0(\Lambda)$ è anche una configurazione ammessa per $Z_0^{\text{eff.}}(\Lambda\smallsetminus\{\alpha\})$, a patto che non contenga cammini con supporto interamente in $\{\alpha\}$, e che, viceversa, ogni configurazione ammessa per $Z_0^{\text{eff.}}(\Lambda\smallsetminus\{\alpha\})$ lo è anche per $Z_0(\Lambda)$. Da questo, e dalla fattorizzazione dei pesi delle configurazioni sui singoli cammini, troviamo

$$Z_0^{\text{eff.}}(\Lambda\smallsetminus\{\alpha\}) = \frac{Z_0(\Lambda)}{Z_0(\{\alpha\})} \tag{8.18}$$

$$F_0^{\text{eff.}}(\Lambda\smallsetminus\{\alpha\}) = F_0(\Lambda) - F_0(\{\alpha\}) \tag{8.19}$$

Un po' più complessa è la situazione per quanto riguarda $Z^{\text{eff.}}(\Lambda\smallsetminus\{\alpha\})$. Sono ammesse nel computo della funzione di partizione tutte quelle configurazioni di cammini per cui la condizione di self-avoidicità sia soddisfatta almeno su tutto $\Lambda\smallsetminus\{\alpha\}$, tranne quelle che presentano anche cammini a supporto tutto in $\{\alpha\}$.

Definiamo $\{\delta\alpha\}$ come l'insieme dei bond che congiungono punti appartenenti ad $\{\alpha\}$ con punti non appartenenti, e con $\delta\alpha$ una configurazione di numeri di occupazione su tali bond. Chiamiamo $Z_{\delta\alpha}(\Lambda \setminus \{\alpha\})$ la somma su tutte le configurazioni di cammini self-avoiding sul reticolo $\Lambda \setminus \{\alpha\}$, visto come sottoreticolo di Λ, compatibili con le condizioni al bordo $\delta\alpha$, ed analogamente definiamo una $Z_{0\,\delta\alpha}(\{\alpha\})$

Si vede che la funzione di partizione cercata è

$$Z^{\text{eff.}}(\Lambda \setminus \{\alpha\}) = \frac{\sum_{\delta\alpha} Z_{\delta\alpha}(\Lambda \setminus \{\alpha\}) Z_{0\,\delta\alpha}(\{\alpha\})}{Z_0(\{\alpha\})} \tag{8.20}$$

$$F^{\text{eff.}}(\Lambda \setminus \{\alpha\}) = \ln \sum_{\delta\alpha} Z_{\delta\alpha}(\Lambda \setminus \{\alpha\}) Z_{0\,\delta\alpha}(\{\alpha\}) - F_0(\{\alpha\}) \tag{8.21}$$

e quindi, in definitiva,

$$\begin{aligned} Q^{\Lambda \setminus \{\alpha\}} &= \ln \sum_{\delta\alpha} Z_{\delta\alpha}(\Lambda \setminus \{\alpha\}) Z_{0\,\delta\alpha}(\{\alpha\}) - F_0(\Lambda) \\ &= (F(\Lambda) - F_0(\Lambda)) + \ln \frac{\sum_{\delta\alpha} Z_{\delta\alpha}(\Lambda \setminus \{\alpha\}) Z_{0\,\delta\alpha}(\{\alpha\})}{\sum_{\delta\alpha} Z_{\delta\alpha}(\Lambda \setminus \{\alpha\}) Z_{\delta\alpha}(\{\alpha\})} \\ &= (F(\Lambda) - F_0(\Lambda)) + \overline{Q}^{\{\alpha\}} \end{aligned} \tag{8.22}$$

Dove abbiamo definito per comodità la nuova quantità $\overline{Q}^{\{\alpha\}}$, in modo tale da poter scrivere

$$f(\overline{\theta}) = F + \sum_{\{\alpha\} \subseteq \Lambda} \overline{\theta}^{|\alpha|} (1 - \overline{\theta})^{N - |\alpha|} \overline{Q}^{\{\alpha\}} \tag{8.23}$$

Studiamo con più attenzione queste nuove quantità:

$$\begin{aligned} \overline{Q}^{\{\alpha\}} &= \ln \frac{\sum_{\delta\alpha} Z_{\delta\alpha}(\Lambda \setminus \{\alpha\}) Z_{0\,\delta\alpha}(\{\alpha\})}{\sum_{\delta\alpha} Z_{\delta\alpha}(\Lambda \setminus \{\alpha\}) Z_{\delta\alpha}(\{\alpha\})} \\ &= \ln \sum_{\delta\alpha} \langle \delta\alpha \rangle \, \frac{Z_{0\,\delta\alpha}(\{\alpha\})}{Z_{\delta\alpha}(\{\alpha\})}; \end{aligned} \tag{8.24}$$

Il termine $\frac{Z_{0\,\delta\alpha}(\{\alpha\})}{Z_{\delta\alpha}(\{\alpha\})}$ fattorizza sui singoli cluster sconnessi di siti rimossi (più brevemente, sulle singole lacune), ed è facile da calcolare per cluster poco estesi. Il termine $\langle \delta\alpha \rangle$ è il valore di aspettazione calcolato sul reticolo completo per la stringa di numeri di occupazione $\delta\alpha$. Sebbene il fatto di calcolarlo sul reticolo originario sia un grosso vantaggio, il calcolo di questa quantità appare comunque piuttosto ostico. Un possibile approccio via equazione DLR verrà discusso più avanti.

In analogia a quanto già fatto per la prima serie, definiamo anche

$$f(\overline{\theta}) = F + \sum_{\{\alpha\} \subseteq \Lambda} \overline{\theta}^{|\alpha|} \overline{\Phi}^{\{\alpha\}} \tag{8.25}$$

$$\overline{\Phi}^{\{\alpha\}} = \sum_{\{\alpha'\} \subseteq \{\alpha\}} (-1)^{|\alpha| - |\alpha'|} Q^{\{\alpha'\}} \tag{8.26}$$

Adesso l'analogia almeno visiva fra i due sviluppi, intorno a $\theta = 0$ ed a $\theta = 1$, è completa.

Anche questo nuovo sviluppo appare promettente. Per $\{\alpha\}$ a bassa densità, per cui è possibile individuare dei piccoli cluster di siti rimossi all'interno di un reticolo rimasto pressocchè immutato, è facile ricondurre le quantità $\overline{Q}^{\{\alpha\}}$ alle funzioni di correlazione dei numeri di occupazione dei bond immediatamente circostanti la lacuna. Inoltre, nella espressione per le $\overline{\Phi}^{\{\alpha\}}$, sopravvivono soltanto termini in cui compaiono le funzioni di correlazione connesse di numeri d'occupazione che circondano tutte le lacune di $\{\alpha\}$, e quindi, per temperature al di sopra della temperatura critica, rimangono dei termini essenzialmente localizzati, così come avveniva per il primo sviluppo in serie.

È forse istruttivo vedere come ciò accade nel primo caso non banale. Avremo ad esempio, per $\overline{\Phi}^{\{\alpha_1,\alpha_2\}}$, dove α_1 e α_2 sono due lacune isolate:

$$\overline{\Phi}^{\{\alpha_1,\alpha_2\}} = \overline{Q}^{\{\alpha_1,\alpha_2\}} - \overline{Q}^{\{\alpha_1\}} - \overline{Q}^{\{\alpha_2\}} (+\overline{Q}^{\{\emptyset\}} = 0); \tag{8.27}$$

$$\begin{aligned}
\overline{Q}^{\{\alpha_1,\alpha_2\}} &= \ln \sum_{\delta\alpha_1,\delta\alpha_2} (\langle\delta\alpha_1\rangle \langle\delta\alpha_2\rangle + \langle\delta\alpha_1\delta\alpha_2\rangle^{\text{conn.}}) \frac{Z_{0\delta\alpha_1}(\{\alpha_1\})}{Z_{\delta\alpha_1}(\{\alpha_1\})} \frac{Z_{0\delta\alpha_2}(\{\alpha_2\})}{Z_{\delta\alpha_2}(\{\alpha_2\})} \\
&= \ln \Bigg[\left(\sum_{\delta\alpha_1} \langle\delta\alpha_1\rangle \frac{Z_{0\delta\alpha_1}(\{\alpha_1\})}{Z_{\delta\alpha_1}(\{\alpha_1\})} \cdot \sum_{\delta\alpha_2} \langle\delta\alpha_2\rangle \frac{Z_{0\delta\alpha_2}(\{\alpha_2\})}{Z_{\delta\alpha_2}(\{\alpha_2\})} \right) \\
&\quad + \sum_{\delta\alpha_1,\delta\alpha_2} \langle\delta\alpha_1\delta\alpha_2\rangle^{\text{conn.}} \frac{Z_{0\delta\alpha_1}(\{\alpha_1\})}{Z_{\delta\alpha_1}(\{\alpha_1\})} \frac{Z_{0\delta\alpha_2}(\{\alpha_2\})}{Z_{\delta\alpha_2}(\{\alpha_2\})} \Bigg] \\
&= \overline{Q}^{\{\alpha_1\}} + \overline{Q}^{\{\alpha_1\}} + \ln \Big[1 + \mathcal{O}\Big(\sum_{\delta\alpha_1,\delta\alpha_2} \langle\delta\alpha_1\delta\alpha_2\rangle^{\text{conn.}} \Big) \Big]
\end{aligned} \tag{8.28}$$

Rimane adesso l'ostacolo maggiore, ovvero il calcolo delle funzioni di correlazione dei numeri di occupazione dei bond. Fortunatamente, però, sempre per $\{\alpha\}$ a bassa densità, ci viene in soccorso una utile espressione, peculiare dei sistemi di spin, nota come *equazione di Dobrushin-Lanford-Ruelle* (o equazione DLR), che mostreremo nelle seguenti sezioni. Infatti non è difficile legare le funzioni di correlazione per gli spin a quelle per i numeri di occupazione. Ad esempio, per un solo numero di occupazione si ha[2]

$$\langle n_{ij} \rangle = \frac{\partial}{\partial \tau_{ij}} \ln Z_{RW}; \tag{8.29}$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} \ln Z_I \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial J_{ij}} (\ln Z_{\text{reg.}} + \ln Z_{RW}) = \tau_{ij} + \frac{1}{1 - \tau_{ij}^2} \langle n_{ij} \rangle \, ; \end{aligned} \tag{8.30}$$

ed il procedimento è facilmente generalizzabile a funzioni di correlazione più complesse.

Per capire come calcolare delle funzioni di correlazione fra gli spin siffatte (dei grappoli di spin, uno intorno a ciascuna lacuna, e distanti fra loro), è necessario fare un lungo *flashback*.

8.3 L'equazione di Dobrushin-Lanford-Ruelle.

Torniamo a parlare dell'approssimazione di campo medio per un reticolo di Ising con interazione a primi vicini, già vista alla sezione 2.5. Questa approssimazione può essere vista come il primo passo di uno sviluppo esatto, in termini delle funzioni di correlazione a più punti, per grappoli di punti vicini, le quali possono essere trovate in maniera autoconsistente.

Riconsideriamo il nostro parametro d'ordine, la magnetizzazione media, che, nel nostro caso di sistema omogeneo, possiamo rimpiazzare col valore di aspettazione di uno spin qualunque. Definendo $\bar{\sigma}$ come la nostra configurazione σ, escluso lo spin σ_i, si ha

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \rangle &= \frac{\sum_\sigma \sigma_i \exp(-\beta H[\sigma])}{\sum_\sigma \exp(-\beta H[\sigma])} \\ &= \frac{\sum_\sigma \exp(-\beta H[\sigma]) \frac{\sum_{\tau_i} \tau_i \exp(-\beta H[\tau_i, \bar{\sigma}])}{\sum_{\tau_i} \exp(-\beta H[\tau_i, \bar{\sigma}])}}{\sum_\sigma \exp(-\beta H[\sigma])} \\ &= \frac{\sum_\sigma \tanh \beta \left(h + J \sum_{j/|i-j|=1} \sigma_j \right) \exp(-\beta H[\sigma])}{\sum_\sigma \exp(-\beta H[\sigma])} \\ &= \left\langle \tanh \beta \Big(h + J \sum_{j/|i-j|=1} \sigma_j \Big) \right\rangle \end{aligned} \tag{8.31}$$

I passaggi algebrici che portano a questa conclusione sono semplici, seppure celati da una notazione pesante. Riscriviamo l'algebra precedente ponendo

[2]Ricordiamo che per mezzo dell'espansione di alte temperature abbiamo scomposto la funzione di partizione per Ising in $Z_I = Z_{\text{reg.}} \cdot Z_{RW}$, dove il primo fattore è noto e regolare.

$\exp(-\beta H[\sigma_i, \bar{\sigma}]) = g(\bar{\sigma}) e^{\sigma_i h_i^{\text{eff.}}}$:

$$
\begin{aligned}
\langle \sigma_i \rangle &= \frac{\sum_{\bar{\sigma}} \sum_{\sigma_i} \sigma_i g(\sigma_i)}{\sum_{\bar{\sigma}} \sum_{\sigma_i} g(\sigma_i)} = \frac{\sum_{\bar{\sigma}} \sum_{\sigma_i} g(\sigma_i) \frac{\sum_{\tau_i} \tau_i g(\bar{\sigma}) e^{\tau_i h_i^{\text{eff.}}}}{\sum_{\tau_i} g(\bar{\sigma}) e^{\tau_i h_i^{\text{eff.}}}}}{\sum_{\bar{\sigma}} \sum_{\sigma_i} g(\sigma_i)} \\
&= \frac{\sum_{\bar{\sigma}} \sum_{\sigma_i} g(\sigma_i) \frac{e^{h_i^{\text{eff.}}} - e^{-h_i^{\text{eff.}}}}{e^{h_i^{\text{eff.}}} + e^{-h_i^{\text{eff.}}}}}{\sum_{\bar{\sigma}} \sum_{\sigma_i} g(\sigma_i)} = \Big\langle \tanh \beta \Big(h + J \sum_{j/|i-j|=1} \sigma_j \Big) \Big\rangle
\end{aligned}
\tag{8.32}
$$

L'equazione appena trovata, nota come *equazione di Dobrushin-Lanford-Ruelle*, o più brevemente equazione DLR, afferma che il valore di aspettazione per un dato spin è esattamente uguale al valore di aspettazione della tangente iperbolica del *campo efficace* che agisce su di esso, ovvero della parte dell'hamiltoniana lineare in quella variabile di spin.

L'equazione di stato del campo medio si riottiene se si approssimano i σ_j che compaiono nella tangente iperbolica con il loro valore di aspettazione. Però, contrariamente all'approccio tradizionale al campo medio, è ora possibile fare di più. Ad esempio, per un sistema di Ising a campo esterno nullo su reticolo esagonale si trova (chiamando σ_0 lo spin centrale e $\sigma_{1,2,3}$ i tre vicini):

$$
\begin{aligned}
\langle \sigma_0 \rangle &= \langle \tanh \beta J (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \rangle = \mathcal{A} \langle \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 \rangle + \mathcal{B} \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle \\
&= 3\mathcal{A} \langle \sigma_0 \rangle + \mathcal{B} \langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle
\end{aligned}
\tag{8.33}
$$

e, imponendo l'uguaglianza nei due casi di spin tutti concordi e di uno spin discorde, si ottiene

$$(+\,+\,+) \qquad \tanh 3\beta J = 3\mathcal{A} + \mathcal{B}; \tag{8.34a}$$

$$(+\,+\,-) \qquad \tanh \beta J = \mathcal{A} - \mathcal{B}; \tag{8.34b}$$

la cui soluzione fissa i valori di $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$. Notiamo che nel precedente passaggio abbiamo potuto sostituire l'operatore "complicato" $\tanh \beta J(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)$ con un semplice polinomio nelle σ_1, σ_2 e σ_3, con soli due parametri liberi, in virtù del fatto che il sistema è un sistema di spin, e quindi ci è bastato imporre la coicidenza dei valori di aspettazione dei due operatori su un numero ridottissimo di configurazioni (le equazioni (8.34a,b)).

Si può seguire un procedimento analogo per trovare l'espressione della funzione di correlazione per tre spin posti "a triangolo", come $\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle$, in termini delle funzioni di correlazione per grappoli di spin un po' più estesi, e così via. Infine, si può arrestare lo sviluppo allo stadio desiderato, ed approssimare il risultato ottenuto sostituendo nelle ultime funzioni di correlazione (ancora incognite) le corrispondenti approssimazioni fattorizzate.

Ad esempio, lo stadio seguente al campo medio prevede di sostituire m al posto di $\langle \sigma_0 \rangle$ (esatto), ed m^3 al posto di $\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle$ (approssimato con la fattorizzazione). Il risultato così ottenuto è sensibilmente migliore rispetto a quello di campo medio per quanto riguarda l'andamento generale delle funzioni di interesse, ma purtroppo non permette affatto di conoscere gli esponenti critici esatti nell'intorno della criticalità.

È rimarchevole il fatto che questo genere di equazioni consente un controllo sulle distribuzioni di probabilità nel limite di volume infinito, in maniera rigorosa.

Al di là dell'interesse generale di queste equazioni, è interessante notare come esse forniscano proprio le quantità che servono per il nostro sviluppo. Ad esempio, come visto alla (8.33), e con l'ausilio delle (8.34a,b), si ha per un reticolo omogeneo a coordinazione tre, per campo esterno nullo

$$\langle\sigma_1\sigma_2\sigma_3\rangle = \frac{4 - 3\tanh 3\beta J - 3\tanh\beta J}{\tanh 3\beta J - 3\tanh\beta J}\,\langle\sigma_0\rangle \tag{8.35}$$

8.4 Equazione di Dobrushin-Lanford-Ruelle per spin distanti.

Abbiamo visto come l'equazione DLR permette di legare le funzioni di correlazione per grappoli di spin localizzati ai valori di aspettazione di tali spin. Un utilizzo un po' meno standard in letteratura del procedimento alla DLR visto sopra è quello che permette di calcolare le funzioni di correlazione per insiemi di grappoli distanti, in termini delle funzioni di correlazione per spin distanti. Ad esempio, per due soli spin distanti avremo:

$$\begin{aligned}
\langle\sigma_i\sigma_j\rangle &= \frac{\sum_{\bar\sigma}\sum_{\sigma_i,\sigma_j}\sigma_i\,\sigma_j\,g(\sigma_i,\sigma_j)}{\sum_{\bar\sigma}\sum_{\sigma_i,\sigma_j}g(\sigma_i,\sigma_j)}\\
&= \frac{\sum_{\bar\sigma}\sum_{\sigma_i,\sigma_j}g(\sigma_i,\sigma_j)\frac{\sum_{\tau_i,\tau_j}\tau_i\,\tau_j\,g(\bar\sigma)\,e^{\tau_i h_i^{\mathrm{eff.}}+\tau_j h_j^{\mathrm{eff.}}}}{\sum_{\tau_i,\tau_j}g(\bar\sigma)\,e^{\tau_i h_i^{\mathrm{eff.}}+\tau_j h_j^{\mathrm{eff.}}}}}{\sum_{\bar\sigma}\sum_{\sigma_i,\sigma_j}g(\sigma_i,\sigma_j)}\\
&= \frac{\sum_{\bar\sigma}\sum_{\sigma_i,\sigma_j}g(\sigma_i,\sigma_j)\frac{e^{h_i^{\mathrm{eff.}}+h_j^{\mathrm{eff.}}}-e^{h_i^{\mathrm{eff.}}-h_j^{\mathrm{eff.}}}-e^{-h_i^{\mathrm{eff.}}+h_j^{\mathrm{eff.}}}+e^{-h_i^{\mathrm{eff.}}-h_j^{\mathrm{eff.}}}}{e^{h_i^{\mathrm{eff.}}+h_j^{\mathrm{eff.}}}+e^{h_i^{\mathrm{eff.}}-h_j^{\mathrm{eff.}}}+e^{-h_i^{\mathrm{eff.}}+h_j^{\mathrm{eff.}}}+e^{-h_i^{\mathrm{eff.}}-h_j^{\mathrm{eff.}}}}}{\sum_{\bar\sigma}\sum_{\sigma_i,\sigma_j}g(\sigma_i,\sigma_j)}\\
&= \Big\langle \tanh\beta\Big(h + J\sum_{i'/|i-i'|=1}\sigma_{i'}\Big)\tanh\beta\Big(h + J\sum_{j'/|j-j'|=1}\sigma_{j'}\Big)\Big\rangle
\end{aligned} \tag{8.36}$$

Questa nuova equazione si affianca alle

$$\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = \Big\langle \tanh\beta\Big(h + J\sum_{i'/|i-i'|=1}\sigma_{i'}\Big)\cdot\sigma_j\Big\rangle; \tag{8.37}$$

$$\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = \Big\langle \sigma_i\cdot\tanh\beta\Big(h + J\sum_{j'/|j-j'|=1}\sigma_{j'}\Big)\Big\rangle; \tag{8.38}$$

che si ottengono da una (più) facile modifica della DLR ordinaria.

Il procedimento appena esposto, generalizzato a funzioni di correlazione fra un numero arbitrario di spin, ci porta ad una conclusione importante dal punto di vista teorico: uno spin ed il campo effettivo che agisce su di esso non hanno soltanto lo stesso valore di aspettazione sul vuoto (stessa funzione di correlazione), ma sono operatorialmente identici (tutte le funzioni di correlazione costruite a partire dalle variabili di spin sono identiche alle corrispondenti con i campi effettivi).

Vediamo come agisce questo metodo in un esempio pratico. Sempre nel caso di coordinazione tre e campo esterno nullo, troviamo:

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \Big\langle \tanh \beta \Big(h + J \sum_{i'/|i-i'|=1} \sigma_{i'} \Big) \cdot \sigma_j \Big\rangle \\ &= \mathcal{A}(\langle \sigma_{i1}\sigma_j \rangle + \langle \sigma_{i2}\sigma_j \rangle + \langle \sigma_{i3}\sigma_j \rangle) + \mathcal{B} \langle \sigma_{i1}\sigma_{i2}\sigma_{i3}\sigma_j \rangle \end{aligned} \tag{8.39}$$

Il fatto che i coefficienti numerici $\mathcal{A}$ sono determinati attraverso una identificazione dell'operatore campo efficace con l'operatore polinomiale nelle σ, eseguita su tutte le possibili configurazioni, e quindi a tutti gli effetti anche a livello operatoriale, ci permette di dedurre che tali coefficienti sono uguali fra loro. Si vede in maniera analoga che i valori di $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ sono uguali a quelli trovati per lo spin isolato.

Abbiamo così determinato le funzioni di correlazione a quattro punti (o meglio, ad un grappolo ed un punto) in termini delle funzioni di correlazione a due punti. Quindi, ripetendo il procedimento per l'equazione DLR modificata, troviamo un sistema di equazioni del tipo

# equaz.	Config.	$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$	$\langle \sigma_{i'} \sigma_{j'} \rangle$	$\langle \sigma^3_{i'} \sigma_{j'} \rangle$	$\langle \sigma_{i'} \sigma^3_{j'} \rangle$	$\langle \sigma^3_{i'} \sigma^3_{j'} \rangle$
1	$+++ \mid +++$	$t_3 \cdot t_3$	$+9$	$+3$	$+3$	$+1$
6	$+++ \mid ++-$	$t_3 \cdot t_1$	$+3$	$+1$	-3	-1
9	$++- \mid ++-$	$t_1 \cdot t_1$	-3	-1	$+3$	$+1$

(8.40)

dove abbiamo indicato con t_k le quantità $\tanh(k\beta J)$, con $\langle \sigma_{i'} \sigma_{j'} \rangle$ le funzioni di correlazione a due punti, uno fra i primi vicini di i ed uno fra i primi vicini di j, e con $\sigma^3_{i'}$ il prodotto delle tre variabili di spin dei tre vicini di i, cioè $\sigma_{i1}\sigma_{i2}\sigma_{i3}$.

Notiamo che anche i parametri liberi a nostra disposizione, i coefficienti delle funzioni di correlazione sui monomi delle σ, sono in numero di 9, 6 ed 1, così come le eguaglianze da imporre. Le stesse simmetrie sfruttate in precedenza, però, ci permettono di ridurci a tre soli parametri e tre equazioni:

$$\begin{cases} t_3^2 = 9C + 6D + E \\ t_3 t_1 = 3C - 2D - E \\ t_1^2 = C + 2D + E \end{cases} \tag{8.41}$$

che hanno soluzione

$$C = \frac{t_1(t_3+t_1)}{4}; \qquad D = \frac{(t_3 - \frac{9}{4}t_1)(t_3+t_1)}{4}; \qquad E = \frac{15}{8}t_1^2 - \frac{1}{8}t_1 t_3 - t_3^2; \tag{8.42}$$

che ci porta a scrivere in definitiva

$$\langle \sigma_{i1}\sigma_{i2}\sigma_{i3}\sigma_{j1}\sigma_{j2}\sigma_{j3}\rangle \simeq \\ \frac{1}{4}\cdot \frac{6t_1^3 + t_1^2 t_3 - 7t_1 t_3^2 + 2t_3^3 - 4t_1^2 + 7t_1 t_3 - 4t_3^2 - 6t_1 + 2t_3}{-45t_1^3 + 18t_1^2 t_3 - 23 t_1 t_3^2 - 8t_3^3} \langle \sigma_i \sigma j\rangle \tag{8.43}$$

dove l'unica approssimazione, non necessaria, del resto, consiste nell'aver considerato le funzioni di correlazione a due punti circa uguali.

In definitiva, il risultato di questo procedimento è che possiamo trovare la quantità $\langle \sigma_{i1}\sigma_{i2}\sigma_{i3}\sigma_{j1}\sigma_{j2}\sigma_{j3}\rangle$ in termini di sole funzioni di correlazione a due punti. Di più, troviamo in generale che funzioni di correlazione per grappoli distanti, a costo di piccole approssimazioni, sono proporzionali alle funzioni di correlazione semplici, con un coefficiente di proporzionalità dipendente dalla temperatura, e conoscibile per mezzo del metodo DLR sviluppato in questa sezione. Queste quantità sono proprio quelle che ci servono per il nostro sviluppo in serie nel caso di lacune distanti.

L'algoritmo completo e definitivo si compone di un certo numero di passi, già esposti nel corso del capitolo, che riassumiamo di seguito per comodità:

1. il punto di partenza sono le formule (8.23, 8.45), che riportiamo:

$$f(\overline{\theta}) = F + \sum_{\{\alpha\}\subseteq\Lambda} \overline{\theta}^{|\alpha|}(1-\overline{\theta})^{N-|\alpha|}\overline{Q}^{\{\alpha\}}; \tag{8.44}$$

$$\overline{Q}^{\{\alpha\}} = \ln \sum_{\delta\alpha} \langle \delta\alpha\rangle \frac{Z_{0\delta\alpha}(\{\alpha\})}{Z_{\delta\alpha}(\{\alpha\})}; \tag{8.45}$$

2. si calcolano le quantità $\frac{Z_{0\delta\alpha}(\{\alpha\})}{Z_{\delta\alpha}(\{\alpha\})}$ per piccoli difetti. Esistono molti metodi per fare ciò. Noi suggeriamo di calcolare manualmente la parte self-avoiding, ed utilizzare i metodi standard di random walk (banalizzati dalla dimensione finita dell'operatore di avanzamento) per la parte libera;

3. si riscrivono i valori di aspettazione $\langle\delta\alpha\rangle$ in termini di funzioni di correlazione per i numeri di occupazione, e quindi queste in termini di funzioni di correlazione per le variabili di spin;

4. si scrivono le equazioni DLR, per spin distanti se $\{\alpha\}$ si compone di più lacune sconnesse, al fine di ricondurre le funzioni di correlazione per grappoli di spin trovate sopra a funzioni di correlazione per spin distanti.

5. si costruisce lo sviluppo in serie visto sopra, lasciando indeterminate le espressioni esplicite per le funzioni di correlazione. Esse in realtà compaiono soltanto integrate, ovvero avremo termini $\sim \langle\sigma_0\rangle$, termini $\sim \sum_i \langle\sigma_0\sigma_i\rangle = \chi_{_{h=0}}$, termini $\sim \sum_{i,j} \langle\sigma_0\sigma_i\sigma_j\rangle$ e così via;

6. si cercano quei valori per le quantità indeterminate al punto precedente *a)* che siano compatibili con l'andamento di $f(\theta,\tau)$ nella variabile di temperatura τ, fin qui trascurata; *b)* che si raccordino meglio con lo sviluppo intorno al modello libero, sia che sia stato ottenuto con una LCE tradizionale, sia che sia stato calcolato col metodo esposto in questa tesi.

Non seguiremo però ulteriormente il calcolo poiché abbiamo già esposto le idee chiave, e l'algebra necessaria è particolarmente tediosa, seppure non difficile.

8.5 La nostra serie come sistema disordinato.

Negli ultimi decenni è sorta la necessità di descrivere sistemi statistici in cui nel campione sono presenti due set di variabili che intervengono nell'hamiltoniana, $[\sigma]$ e $[J]$, con distribuzioni a priori $\mathcal{P}[\sigma]$ e $\mathcal{P}[J]$, ed in cui le variabili σ evolvono su scale di tempi molto inferiori rispetto alle variabili J.

In questi sistemi dapprima le σ termalizzano a J fissata, dando luogo ad una funzione di partizione Z_J, ad una energia libera per sito f_J, e similmente per ogni altro funzionale, infine, per ciascun funzionale, il valore di aspettazione sarà dato dalla sua media su J.

Ad esempio, per l'energia libera non avremo

$$Z \neq \sum_{[J]}\sum_{[\sigma]} \mathcal{P}[J]\ \mathcal{P}[\sigma]\ e^{-\beta H_J[\sigma]}; \tag{8.46}$$

$$f \neq -\frac{1}{\beta N} \ln \sum_{[J]}\sum_{[\sigma]} \mathcal{P}[J]\ \mathcal{P}[\sigma]\ e^{-\beta H_J[\sigma]}; \tag{8.47}$$

bensì

$$Z_J = \sum_{[\sigma]} \mathcal{P}[\sigma]\ e^{-\beta H_J[\sigma]}; \tag{8.48}$$

$$\overline{f} = -\frac{1}{\beta N} \sum_{[J]} \mathcal{P}[J] \ln Z_J = \tag{8.49}$$

$$= -\frac{1}{\beta N} \sum_{[J]} \mathcal{P}[J] \ln \sum_{[\sigma]} \mathcal{P}[\sigma]\ e^{-\beta H_J[\sigma]}; \tag{8.50}$$

Notiamo che, anche qualora le $\mathcal{P}[\sigma]$ e $\mathcal{P}[J]$ conservassero le simmetrie del reticolo (ad es. l'invarianza sotto traslazioni discrete), le σ comunque termalizzerebbero di volta in volta con una configurazione di J fissata (o "congelata", in inglese "quenched"), che in generale ha perso tale simmetria, rompendo l'ordine del reticolo. Per questo si parla di *disordine quenched.*

L'interesse sempre crescente di questi ultimi anni per i fenomeni connessi a tale situazione fisica ha portato al sorgere di una vasta letteratura in proposito. Uno dei tanti modelli studiati è quello che simula il disordine dovuto alla presenza di difetti localizzati a corto raggio di influenza (ovvero che non introducono nel mezzo degli stress che non siano compensati a distanze dell'ordine del passo reticolare).

Un modo per simulare questa situazione su un modello di Ising ordinato, ad esempio, potrebbe essere quello di rimuovere qualche sito reticolare qua e là, con probabilità scorrelate. Un altro modo potrebbe essere quello di raddoppiare il momento magnetico di uno spin qua e là, sempre con probabilità scorrelate. Questi due tipi di disordine hanno effetti opposti, ad esempio, sullo spostamento della temperatura critica, poiché il primo sfavorisce l'ordinamento mentre il secondo lo favorisce, ma per quanto riguarda gli esponenti critici è plausibile che le variazioni introdotte siano identiche, poiché identica è la simmetria che viene rotta.

A questo punto possono sorgere un certo numero di domande:

- la presenza del disordine muta la classe di universalità originaria del reticolo ordinato?
- se si, differenti tipi di disordine portano a sistemi appartenenti a differenti classi di universalità?
- se tipi di disordine con effetti opposti fanno passare il sistema ordinato alla stessa nuova classe di universalità, esiste un tipo di disordine "intermedio" non banale per cui il sistema non cambia classe di universalità, o la sola rottura di simmetria, anche senza effetti evidenti, è causa di un cambio di classe di universalità?

Ai primi due punti sappiamo dare una risposta grazie al criterio di Harris, che enunciamo di seguito (si veda anche l'articolo originale [27], o l'esposizione in [7]). Al terzo punto troveremo una risposta inaspettata nei nostri risultati degli scorsi paragrafi.

Teorema 8.5.1 (Criterio di Harris per la rilevanza del disordine). *Per ogni sistema ordinato possono verificarsi due casi: l'introduzione di disordine con correlazioni a corto range porta il sistema in una nuova classe di universalità, la stessa indipendentemente dal meccanismo del disordine, oppure nessun disordine a corto range porta il sistema in una nuova classe di universalità. Questi due casi avvengono rispettivamente se per il sistema ordinato vale*

$$D\nu > 2 \qquad \textit{(disordine rilevante)} \tag{8.51}$$

$$D\nu < 2 \qquad \textit{(disordine irrilevante)} \tag{8.52}$$

Nel caso in cui valga la relazione di iperscala, il criterio diviene

$$\alpha > 0 \qquad \text{(disordine rilevante)} \tag{8.53}$$

$$\alpha < 0 \qquad \text{(disordine irrilevante)} \tag{8.54}$$

Osserviamo che, sebbene per molti modelli in dimensione tre l'esponente critico α sia effettivamente minore di zero, Ising 3D è una rimarchevole eccezione, poiché gli sviluppi in serie più recenti producono stime per $\alpha \simeq 0,1$ con barre d'errore ben lontane dallo zero.

La dimostrazione di Harris passa attraverso metodi di gruppo di rinormalizzazione, che permettono di capire quando un certo termine dell'hamiltoniana ha un ruolo chiave nell'appressarsi alla temperatura critica e quando ciò non avviene.

Un operatore è rilevante quando rappresenta una direzione di fuga del flusso di rinormalizzazione. Il flusso di rinormalizzazione è un insieme di omomorfismi ad un parametro (per l'esattezza un semigruppo) nello spazio dei possibili sistemi. Gli autospazi di questa mappa sono le classi di universalità, ed i punti fissi hanno un ruolo cruciale nello studio della classe ad essi corrispondente. Il punto fisso avrà direzioni stabili e direzioni instabili. Lo spazio generato dalle direzioni stabili è tangente al sottospazio corrispondente alla classe di universalità del punto fisso in questione. Il flusso di rinormalizzazione lungo le altre direzioni, invece, allontana dal punto fisso e porta verso un altro punto fisso, e quindi sistemi che hanno componente non nulla, per quanto piccola, anche per uno solo degli operatori rilevanti appartengono ad un'altra classe di universalità. Il criterio di Harris ci dice che il disordine è rilevante se vale $\alpha > 0$. In questo caso, quindi, se ci troviamo anche molto vicini al punto fisso nello spazio dei parametri (ovvero se abbiamo un disordine anche molto diluito), qualora la coordinata associata alla direzione di fuga dovuta al disordine non sia esattamente nulla, il sistema apparterrà ad un'altra classe di universalità. È però insita nel meccanismo del gruppo di rinormalizzazione la presenza di uno spiraglio: se quella coordinata è esattamente nulla, allora il sistema non cade lungo la direzione instabile, ma, quasi "in equilibrio" sul crinale, raggiunge il punto fisso.

I metodi del gruppo di rinormalizzazione prevedono quindi la possibilità di avere tutto un sottospazio nello spazio dei parametri per cui si ha questo sottile equilibrio, e questa situazione è contemplata (o meglio, sottointesa) dal criterio di Harris.

Nel nostro caso il punto fisso è quello del modello di Ising (meglio noto come punto fisso φ^4).

Andiamo a rileggere l'espressione per la nostra serie trovata alla sezione 8.1:

$$f(\theta) = F_0 + \sum_{\{\alpha\}\subseteq\{1,\ldots N\}} \theta^{|\alpha|}(1-\theta)^{N-|\alpha|}\big(F^{\text{eff.}}(\{\alpha\}) - F_0^{\text{eff.}}(\{\alpha\})\big) \tag{8.55}$$

che riscriveremo, con l'ausilio della (8.19)

$$f(\theta) = \sum_{\{\alpha\}\subseteq\{1,\dots N\}} \theta^{|\alpha|}(1-\theta)^{N-|\alpha|}\big(F^{\text{eff.}}(\{\alpha\}) + F_0(\Lambda \setminus \{\alpha\})\big) \tag{8.56}$$

dove ricordiamo che le quantità "effettive" (con *eff.* ad apice) sono calcolate per reticolo modificato come da figura 8.1, mentre quelle senza apice sono calcolate sul reticolo semplicemente troncato.

Questa serie è stata introdotta da principio al solo fine di calcolarla per $\theta = 1$, ovvero nel caso del modello di Ising. Però, per quanto visto alla sezione 7.4, il suo valore per θ intermedi non è affatto un semplice punto di interpolazione, è bensì l'energia libera di un ben preciso modello, con lagrangiana locale definita dai semi-invarianti semplici $\mu_{0\theta}(2n)$, ed appartenente alla classe di universalità per il problema φ^4. L'espressione trovata sopra, quindi, *deve* presentare, per $\theta \to 1$, una unica singolarità in prossimità di quella per il modello di Ising, e della stessa natura.

Però possiamo anche definire delle variabili ε_i di disordine quenched, associate ai siti del reticolo. Queste variabili corrisponderanno a siti non rimossi con probabilità pari a θ, ed a siti rimossi con probabilità pari a $1-\theta$. Una volta fissati gli spin rimossi, si decora il reticolo con il procedimento di figura 8.1. Il valor medio dell'energia libera per questo sistema disordinato, per quanto visto all'inizio della sezione, è formalmente identico alla prima parte della formula (8.56), ovvero

$$\overline{\langle F\rangle_\theta} = \sum_{\{\alpha\}\subseteq\{1,\dots N\}} \theta^{|\alpha|}(1-\theta)^{N-|\alpha|} F^{\text{eff.}}(\{\alpha\}) \tag{8.57}$$

Nel limite di $\theta \simeq 1$, la restante parte dell'equazione, ovvero

$$f(\theta) = \sum_{\{\alpha\}\subseteq\{1,\dots N\}} \theta^{|\alpha|}(1-\theta)^{N-|\alpha|} F_0(\Lambda \setminus \{\alpha\}) \tag{8.58}$$

corrisponde all'energia libera del modello libero mediata su un disordine che rende il reticolo estremamente rarefatto, e quindi non dà nessun contributo significativo nell'intorno della criticalità per il modello di Ising.

Concludiamo quindi che, a dispetto delle previsioni del criterio di Harris, questo particolare tipo di disordine è proprio uno di quelli per i quali la coordinata del parametro rilevante per il disordine è nulla. Abbiamo cosìtrovato non perturbativamente il sottospazio dei parametri stabile sotto il flusso di rinormalizzazione, e non ci sembra che esista nessuna banale manipolazione algebrica che faccia riconoscere facilmente proprio quel nostro tipo di disordine come uno con coordinata nulla nello spazio delle fasi, e che in realtà non ha influenza sul sistema.

In ultimo, osserviamo che, una volta dimostrata la possibilità di estendere lo sviluppo per i modelli ordinati a lagrangiane locali generiche, così come avviene per la Linked Cluster Expansion (l'idea di questo procedimento è esposta in chiusura della sezione 7.4), allora il sottospazio, stabile sotto flusso di rinormalizzazione, da noi trovato diviene molto più grande.

Capitolo 9

Prospettive

Il metodo di Kac e Ward, argomento principe di questo lavoro di tesi, è anche il motivo ispiratore delle numerose estensioni, generalizzazioni e variazioni sul tema in essa trattate. Questo è indice di quanto noi riteniamo tale strumento, a cinquanta anni dalla sua ideazione, ancora gravido di spunti di riflessione.

Le strade da noi seguite, più che giungere ad una meta definitiva e consolidata, hanno aperto ancora nuove strade e nuove prospettive, in gran parte dai contorni ancora indefiniti.

In queste pagine conclusive proveremo a delinearne un panorama di massima, seguendo in questo un ordine che rispecchi approssimativamente il grado di ambizione della meta prefissata.

Estensione a lagrangiane locali generiche: Abbiamo già detto che l'analogia fra la Linked Cluster Expansion e la nostra serie, ed il fatto che la prima, a differenza della seconda, si possa portare a termine efficacemente per lagrangiane locali pressocché arbitrarie, ci fa supporre che una simile proprietà valga anche per il nostro sviluppo, e debba ancora essere riconosciuta. Il sospetto maggiore è che la generalizzazione possa avvenire a due livelli: 1) il funzionamento di un procedimento di cancellazione generalizzato; 2) l'implementabilità del calcolo delle funzioni generatrici per mezzo dei reticoli completi a k punti, con lagrangiana locale generica. Proveremo a verificare tale congettura.

Legami con la Linked Cluster Expansion: Da quanto visto risulta evidente che esiste un rapporto molto stretto fra la tradizionale espansione LCE ed il nostro sviluppo, almeno per particolari classi di problemi. Ritengo che potrebbe essere profiquo uno studio più approfondito di questi legami.

In particolar modo potrebbe essere utile ricostruire a livello di Linked Cluster Expansion i meccanismi di cancellazione esatta che intervengono nel metodo di Kac e Ward per reticoli planari. A tal fine è d'obbligo generalizzare il nostro metodo a modelli bSAW, non soltanto dal punto di vista teorico (mostrando che le cancellazioni sono possibili, e trovando il complesso algoritmo ricorsivo che le genera), ma anche da quello pratico, implementando il calcolo delle funzioni generatrici.

Questo non è difficile, se si riformula in nuovi termini il nostro procedimento. Infatti è facile trovare un metodo ricorsivo per trovare il determinante od il permanente di una matrice $n \times n$ generica, in termini di un suo minore, semplicemente applicando al polinomio corrispondente un opportuno operatore differenziale. Ebbene, l'operatore differenziale che genera il calcolo della funzione di partizione per il problema bSAW è una semplice modifica di quello che genera, attraverso il permanente, la funzione di partizione per il modello vSAW. Dovrebbe quindi essere possibile portare a termine questo progetto senza troppe difficoltà.

Non altrettanto semplice appare la parte successiva del procedimento, che ha come parte programmatica quella di identificare i termini dei due sviluppi. Le complicazioni sono però più di carattere combinatorio che concettuale.

Rapporto con il Bethe Ansatz: La lunga analisi nel corso di questa tesi ci ha portato a supporre che il meccanismo di Kac e Ward sia non un utile e fortunoso accidente di combinatoria, bensì la rappresentazione grafica di proprietà molto generali. In un articolo di V. B. Priezzhev [**?**] si discute la possibilità che l'applicabilità del meccanismo di cancellazione sia in relazione con la veridicità di una formulazione del *Bethe Ansatz* per il modello in questione, e si suffraga questa ipotesi attraverso lo studio di una particolare classe di cammini direzionati.

Sarebbe interessante riproporre un argomento simile nel caso di cammini non direzionati, ed eventualmente trovare per mezzo di esso un metodo per formulare il Bethe Ansatz in un caso generale.

Sviluppo intorno al punto fisso dei Branched Polymers: Abbiamo visto, per mezzo della LCE, come il nostro sviluppo corrisponde ad una espansione intorno al punto fisso gaussiano. Esistono, però, altri modelli esattamente risolubili in dimensione generica, che potrebbero divenire un buon punto di partenza per uno sviluppo. Uno di essi in particolar modo sembra prestarsi molto bene a tal fine: il modello dei polimeri ramificati.

Abbiamo discusso, seguendo in ciò Kasteleyn, come il punto cruciale della non risolubilità di un modello di spin risieda nel fatto che il reticolo da esso descritto abbia genus infinito. Infatti, se per i volumi troncati abbiamo un genus macroscopico $g \sim N$, il numero di termini necessari per il calcolo esatto, pari a 4^g a volume finito, diverge nel limite di volume infinito.

Abbiamo dato un argomento di plausibilità perchè questi termini siano in relazione con le classi di omologia rispetto a $\mathbb{Z}_2$. Sappiamo anche che è facile mettere in relazione degli alberi con dei cammini chiusi contraibili, ovvero della classe di omologia labellata dall'identità. Una prima idea potrebbe essere quella di eseguire uno sviluppo in cui l'ordine perturbativo sia dato dal modulo della stringa di numeri di occupazione sui generatori del gruppo di omologia (ovvero dal numero complessivo di giri compiuti). Dato che per incrementare di uno il numero di occupazione corrispondente ad un generatore si deve compiere un certo numero minimo di passi, le opportune troncate di questa serie coinciderebbero con le troncate della serie di alte temperature.

L'approccio di Regge-Zecchina: Esiste un approccio, alternativo a quello visto sopra, all'analisi del numero divergente di termini derivanti dall'applicazione del metodo di Kac e Ward. Tale approccio, suggerito da T. Regge e R. Zecchina [**?**], [**?**], prevede lo studio di particolari relazioni fra i termini della serie. In particolar modo, se il reticolo è derivato da un gruppo finitamente presentato, si scopre che esiste una simmetria interna del problema (legata al primo gruppo di coomologia del reticolo) per cui le orbite dell'azione della simmetria nello spazio dei termini (ovvero sul primo gruppo di omologia) individuano termini identici. Tali orbite possono essere più o meno ampie, e la speranza è che nel limite termodinamico si riescano a controllare i termini corrispondenti a classi macroscopiche, e le cardinalità delle orbite corrispondenti.

La serie per i vetri di spin: A dispetto del posizionamento di questo paragrafo in chiusura di tesi, non è difficile generalizzare il nostro sviluppo in serie al caso di vetri di spin. Infatti uno dei pregi del nostro sviluppo, (pregio in comune con la LCE), è quello di restituire direttamente il valore delle quantità di interesse (le funzioni a q punti), rendendo quindi possibile distribuire sugli addendi della serie la media sul disordine, anche senza passare attraverso il metodo delle repliche. Questa osservazione è già stata fatta nel caso della LCE da H. Meyer-Ortmanns e T. Reisz, i quali hanno messo a punto una generalizzazione per sistemi disordinati che va sotto il nome di DLCE, o LCE dinamica [16].

Il legame più interessante fra la nostra serie ed i vetri di spin, però, è dato dai possibili risultati esatti, che mettono in relazione certe quantità di un reticolo regolare con altre quantità del corrispondente reticolo di spin. Il procedimento sembra particolarmente promettente nel caso di sistemi bidimensionali, in cui una certa reminescenza delle proprietà topologiche del piano facilita anche il problema disordinato.

Purtroppo non abbiamo sufficiente spazio qui per discutere i primi risultati in questo senso, né questi sono sufficientemente consolidati per permetterci di farne una analisi lucida. Il problema, comunque, si presenta ricco di spunti interessanti.

Appendice A

Random walks e dimeri: definizioni, modelli e tecniche.

Raccogliamo in questa appendice il formalismo concernente i problemi di random walks e le tassellazioni con dimeri. Le finalità sono principalmente due: definire un glossario per gli oggetti trattati ed i modelli studiati, e raccogliere alcune utili formule derivanti dalla teoria standard.

- RW – random walks:

Sia dato un reticolo Λ, con punti p_i. Indicheremo con ω un cammino chiuso (non puntato), ovvero un insieme ordinato di punti, adiacenti sul reticolo, modulo la scelta del primo:

$$\omega = (p_1, \cdots p_L) \equiv (p_l, \cdots p_L, p_1, \cdots p_{l-1}), \tag{A.1}$$

con $|\omega| = L$ intenderemo il numero di passi compiuti dal reticolo.

Indicheremo con $\omega : a \to b$ un cammino aperto dal punto p_a al punto p_b,

$$\omega : a \to b = (p_a \equiv p_1, p_2, \cdots p_L \equiv p_b), \tag{A.2}$$

Adotteremo spesso la notazione $|\omega| = L$, numero di passi del cammino.

Indicheremo con Ω un insieme non ordinato di cammini chiusi,

$$\Omega = \{\omega_1, \cdots \omega_k\}. \tag{A.3}$$

e con $\Omega : a \to b$ l'insieme di un Ω e di un $\omega : a \to b$,

$$\Omega : a \to b = \{\omega : a \to b; \omega_1, \cdots \omega_k\}. \tag{A.4}$$

L'insieme dei cammini ω è detto insieme dei *random walks*.

Definiremo *problema di random walks* un problema che ha come funzione di partizione e di correlazione a due punti

$$Z_{RW} = \sum_{\Omega} \mathrm{Peso}(\Omega); \tag{A.5}$$

$$\langle ab \rangle = Z_{RW}^{-1} \sum_{\Omega:a\to b} \mathrm{Peso}(\Omega : a \to b); \tag{A.6}$$

per una certa funzione peso.

Definiremo *problema di random walks liberi* (FW, free random walks) su reticolo Λ il problema di random walks per cui, definendo

$$M_{ab} = \mathrm{Peso}\big(\omega^{(1)} : a \to b \equiv (p_a, p_b)\big); \tag{A.7}$$

valga

$$\mathrm{Peso}\big(\omega = (p_1, \cdots p_L)big) = M_{p_1p_2} \cdot M_{p_2p_3} \cdot \ \cdots M_{p_Lp_1}; \tag{A.8}$$

$$\mathrm{Peso}\big(\omega : a \to b = (p_a \equiv p_1, p_2, \cdots p_L \equiv p_b)\big) = M_{p_ap_2} \cdot M_{p_2p_3} \cdots M_{p_{L-1}p_b}; \tag{A.9}$$

$$\mathrm{Peso}(\Omega) = \mathrm{Peso}(\omega_1) \cdot \ \cdots \mathrm{Peso}(\omega_k); \tag{A.10}$$

$$\mathrm{Peso}(\Omega : a \to b) = \mathrm{Peso}(\Omega) \cdot \mathrm{Peso}(\omega : a \to b); \tag{A.11}$$

La matrice M_{ab} definita sopra è detta *matrice di transfer* del reticolo, o propagatore ad un passo, e la funzione peso viene indicata col nome:

$$\mu_0(\omega) = \mathrm{Peso}_{FW}(\omega); \tag{A.12}$$

Analizziamo alcuni sottoinsiemi dell'insieme dei random walks, ed i problemi ad essi correlati:

- vSAW – vertex self-avoiding walks:

Un ω_{vSAV} è un cammino chiuso non puntato, senza intersezioni sui vertici, se per esso vale la condizione

$$\omega = (p_1, \cdots p_L); \quad p_i \neq p_j \ \forall \ i \neq j; \tag{A.13}$$

Un Ω_{vSAV} è un insieme (o configurazione) non ordinato di cammini chiusi non puntati, senza intersezioni sui vertici, se per esso vale la condizione

$$\Omega = \{\omega_1, \cdots \omega_k\}; \tag{A.14}$$

$$\omega_h = (p_1^{(h)}, \cdots p_L^{(h)}); \quad p_i^{(h)} \neq p_j^{(h')} \text{ a meno che } i = j; \ h = h'; \tag{A.15}$$

In maniera analoga saranno definiti $\omega_{\mathrm{vSAV}} : a \to b$ e $\Omega_{\mathrm{vSAV}} : a \to b$.

Definiremo *problema di random walks self-avoiding sui vertici* (vSAW) su reticolo Λ con matrice di transfer M_{ab} il problema di random walks per cui la funzione peso è data da

$$\mathrm{Peso}_{\mathrm{vSAW}}(\omega) = \mu_0(\omega) \cdot \delta_{\mathrm{vSAW}}; \tag{A.16}$$

dove la funzione δ_{vSAW} restituisce uno o zero a seconda che il cammino sia vSAW o meno.

- bSAW – bond self-avoiding walks:

Un ω_{bSAV} è un cammino chiuso non puntato, senza attraversamenti multipli dello stesso bond, se per esso vale la condizione

$$\omega = (p_1, \cdots p_L); \quad (p_i, p_{i+1}) \neq (p_j, p_{j+1}) \ \forall \ i \neq j; \tag{A.17}$$

dove le coppie (p_i, p_{i+1}) sono non ordinate.

Un Ω_{bSAV} è un insieme (o configurazione) non ordinato di cammini chiusi non puntati, senza attraversamenti multipli dello stesso bond, se per esso vale la condizione

$$\Omega = \{\omega_1, \cdots \omega_k\}; \tag{A.18}$$

$$\omega_h = (p_1^{(h)}, \cdots p_L^{(h)}); \tag{A.19}$$

$$(p_i^{(h)}, p_{i+1}^{(h)}) \neq (p_j^{(h)}, p_{j+1}^{(h)}) \text{ a meno che } i = j; \ h = h'; \tag{A.20}$$

In maniera analoga saranno definiti $\omega_{\mathrm{bSAV}} : a \to b$ e $\Omega_{\mathrm{bSAV}} : a \to b$.

Definiremo *problema di random walks self-avoiding sui bonds* (bSAW) su reticolo Λ con matrice di transfer M_{ab} il problema di random walks per cui la funzione peso è data da

$$\mathrm{Peso}_{\mathrm{bSAW}}(\omega) = \mu_0(\omega) \cdot \delta_{\mathrm{bSAW}}; \tag{A.21}$$

dove la funzione δ_{bSAW} restituisce uno o zero a seconda che il cammino sia bSAW o meno.

Notiamo per inciso che la condizione di essere bSAW per reticoli di coordinazione tre è equivalente alla condizione di essere vSAW combinata con la condizione per i cammini di non compiere inversioni di marcia ($p_i \neq p_{i+2} \ \forall \ i$. Un cammino per cui vale questa condizione è detto in inglese *non backtracking*).

- Proprietà della matrice di transfer e propagatore libero:

Nel caso di random walks liberi valgono delle utili relazioni, dirette conseguenze della fattorizzazione dei pesi sui singoli passi:

$$\sum_{\substack{\omega : a \to b \\ |\omega| = L+1}} \mu_0(\omega : a \to b) = \sum_c M_{cb} \sum_{\substack{\omega : a \to c \\ |\omega| = L}} \mu_0(\omega : a \to c) \tag{A.22}$$

$$\sum_{\substack{\omega : a \to b \\ |\omega| = L}} \mu_0(\omega : a \to b) = (M^L)_{ab}; \tag{A.23}$$

$$\sum_a \sum_{\substack{\omega : a \to a \\ |\omega| = L}} \mu_0(\omega : a \to a) = \mathrm{tr}(M^L); \tag{A.24}$$

$$\sum_L \frac{1}{L} \sum_a \sum_{\substack{\omega : a \to a \\ |\omega| = L}} \mu_0(\omega : a \to a) = -\,\mathrm{tr} \ln(I - M) = -\ln\det(I - M); \tag{A.25}$$

Definiamo inoltre la quantità

$$G_{ab} = \sum_{L=1}^{+\infty} \sum_{\substack{\omega : a \to b \\ |\omega| = L}} \mu_0(\omega : a \to b) = \sum_{L=1}^{+\infty} (M^L)_{ab} = \left[I - (I - M)^{-1} \right]_{ab}; \quad \text{(A.26)}$$

detta propagatore libero.

Notiamo che la matrice di transfer lavora egregiamente anche nella base dei bond orientati, ovvero potremo definire

$$M_{\langle ij \rangle \langle kl \rangle} = \delta_{jk} \sqrt{M_{ij} M_{kl}}; \quad \text{(A.27)}$$

Questa formulazione ha il vantaggio di implementare facilmente la condizione di essere non backtracking discussa sopra. Infatti basterà porre

$$M^{(nbt)}_{\langle ij \rangle \langle kl \rangle} = \delta_{jk} (1 - \delta_{il}) \sqrt{M_{ij} M_{kl}}; \quad \text{(A.28)}$$

- RW su reticolo orientato:

Nella gran parte dei modelli di random walks su reticolo, con constraints vari sull'ensemble, si sceglie di solito per il reticolo una matrice di transfer simmetrica. Questa forma per la matrice rispecchia l'assegnazione di una energia ad ogni bond del reticolo, ed una ampiezza per passare da un estremo all'altro del bond indipendente dal verso di percorrenza, così come ci si aspetterebbe da un peso "alla Gibbs".

Accanto a questa forma standard possono capitare situazioni in cui la matrice di transfer ha altre proprietà. Un caso importante è quello di reticoli orientati.

Un reticolo orientato è un reticolo sul quale i cammini ammessi possono percorrere i bond solo in un verso, rappresentato graficamente con una freccia. Questa proprietà si traduce in una matrice di transfer per cui vale

$$\forall\ i, j \quad M_{ij} \cdot M_{ji} = 0; \quad \text{(A.29)}$$

- DC – Configurazioni di dimeri:

Per quanto visto sopra, le configurazioni Ω_{bSAW} possono anche essere definite come quei sottografi del reticolo dove ogni vertice ha coordinazione due o zero. Una lieve modifica di questa caratterizzazione ci porta a definire le configurazioni di dimeri (DC, dimer coverings) di un reticolo come i sottografi dove ogni vertice ha coordinazione uno o zero:

$$\Gamma = \{(p_1, p_2), (p_3, p_4), \cdots, (p_{2k-1}, p_{2k})\}; \quad \text{(A.30)}$$

$$|p_{2i-1}, p_{2i}| = 1; \qquad p_i \neq p_j\ \forall\ i \neq j; \quad \text{(A.31)}$$

dove le coppie di punti non sono ordinate nè al loro interno, nè fra di loro.

Definiamo *problema di dimeri* il problema che ha come stati le configurazioni di dimeri sul reticolo, senza overlap, ed energia associata ad uno stato pari alla somma, sui bond occupati da un dimero, del potenziale chimico ε_{ij} associato al bond, e quindi hanno funzione di partizione e di correlazione a due punti:

$$Z_{DC} = \sum_{\Gamma} e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle} \varepsilon_{ij} n_{ij}}; \tag{A.32}$$

$$\langle n_{ij} n_{kl} \rangle = Z_{DC}^{-1} \sum_{\Gamma} n_{ij} n_{kl} \, e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle} \varepsilon_{ij} n_{ij}} = Z_{DC}^{-1} \sum_{\Gamma} \prod_{\langle ij \rangle} J_{ij}^{n_{ij}}; \tag{A.33}$$

- <u>CpDC – Tassellazioni compatte di dimeri:</u>

Esiste una variante particolarmente interessante del problema dei dimeri. In essa si pone sull'ensemble la restrizione che i dimeri non lascino lacune, ovvero che la coordinazione di tutti i siti sia uno. Chiameremo questo problema CpDC, ovvero close-packed dimer coverings, o tassellazioni compatte di dimeri.

Una configurazione ammessa è quindi un modo di raccogliere in coppie i siti del reticolo. Ciascuna coppia porterà un fattore di Gibbs legato al potenziale chimico del bond corrispondente, ed eventualmente il bond non esista, un fattore zero. Questa modo di rileggere il problema mette in relazione la funzione di partizione per le CpDC con un oggetto combinatorio, l'Hafniano, così definito per una matrice antisimmetrica A di dimensione pari (=2m):

$$\mathrm{Hf}\, A = \sum_{\substack{\sigma \in \mathfrak{S}_{2m} \\ \sigma_{2i} < \sigma_{2i+1}}} \prod_{i=1}^{m} A_{\sigma_{2i} \sigma_{2i+1}} = \frac{1}{2^m m!} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{2m}} \prod_{i=1}^{m} A_{\sigma_{2i} \sigma_{2i+1}}; \tag{A.34}$$

Di esso rimarchiamo l'utile proprietà per cui, data una matrice antisimmetrica di dimensione pari, il suo Hafniano al quadrato è pari al suo permanente

$$(\mathrm{Hf}\, A)^2 = \mathrm{per}\, A \tag{A.35}$$

dove il permanente è definito (per matrici generiche) come

$$\mathrm{per}\, A = \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{2m}} \prod_{i=1}^{2m} A_{i \sigma_i}; \tag{A.36}$$

Questa eguaglianza, seppure di algebra elementare, vale la pena di essere analizzata, in quanto ha un corrispettivo grafico dalle utili implicazioni. Ricordiamo la rappresentazione di un elemento del gruppo simmetrico in termini di cicli. L'antisimmetricità di A impone che il contributo delle permutazioni con anche un solo ciclo di ordine dispari sia nullo (ad esempio, il contributo dei termini $A_{12} A_{23} A_{31} \cdots$ si elide con quello dei termini

$A_{13}A_{32}A_{21}\cdots = -A_{31}A_{23}A_{12}\cdots$), e rimangono quindi soltanto permutazioni con cicli tutti di ordine pari. Le loro rappresentazioni figurative come cicli sul reticolo sono una sorta di "close-packed vSAW", ovvero degli insiemi di cammini chiusi tali per cui la coordinazione di ciascun vertice sia esattamente due. Anche la sovrapposizione di due arbitrarie configurazioni di dimeri è un oggetto siffatto, in quanto la pura sovrapposizione di due grafi porta ad un grafo che ha come coordinazione a ciascun vertice la somma delle coordinazioni per i due grafi. A meno di controllare qualche irrilevante fattore numerico, abbiamo verificato la formula (A.34), approfondendo alcuni aspetti di combinatoria utili per i nostri sistemi.

Formule simili a quelle viste sopra valgono anche per lo Pfaffiano di una matrice antisimmetrica, definito come

$$\mathrm{Pf}\,A = \sum_{\substack{\sigma\in\mathfrak{S}_{2m}\\ \sigma_{2i}<\sigma_{2i+1}}} \epsilon(\sigma)\prod_{i=1}^{m} A_{\sigma_{2i}\sigma_{2i+1}} = \frac{1}{2^m m!}\sum_{\sigma\in\mathfrak{S}_{2m}} \epsilon(\sigma)\prod_{i=1}^{m} A_{\sigma_{2i}\sigma_{2i+1}}; \qquad (A.37)$$

e per il quale vale la proprietà analoga alla (A.34) (anche nella dimostrazione)

$$(\mathrm{Pf}\,A)^2 = \det A. \qquad (A.38)$$

Bibliografia

[1] G. Parisi, *Statistical Field Theory,* Advanced Book Classics, (1988)

[2] R. Feynman, *Statistical Mechanics: a Set of Lectures,* W.A. Benjamin, New York (1972)

[3] C. Itzykson, J.M. Drouffe, *Statistical Field Theory,* Cambridge University Press, (1989)

[4] R.J. Baxter, *Exatly solved models in Statistical Mechanics,* Academic Press, San Diego, (1982)

[5] B.M. McCoy, T.T. Wu, *The Two-Dimensional Ising Model,* Harvard University Press, Cambridge (1978)

[6] D. Ruelle, *Statistical Mechanics – rigorous results,* Benjamin (1969)

[7] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics,* Cambridge University Press, (1996)

[8] F. Strocchi, *Spontaneous Symmetry Breacking in Quantum Systems,* Quaderni della Scuola Normale, (in fase di pubblicazione)

[9] F. Strocchi, *Elements of Quantum Mechanics of Infinite Systems,* World Scientific, Singapore (1985)

[10] V.V. Prasolov, A.B. Sossinsky, *Knots, Links, Braids and 3-manifolds: an introduction to the new invariants in low-dimensional topology,* American Mathematical Society (transl. of Mathematical Monographs 154), (1997)

[11] P.W. Kasteleyn, *Graph theory and crystal physics,* in *Graph Theory and Theoretical Physics,* Academic Press, New York, (1967)

[12] *Phase Transition and Critical Phenomena,* vol.3, eds. C. Domb e M.S. Green, Academic Press, London, (1974)

[13] M. Campostrini, *arXiv: cond-mat/0005130* maggio 2000

[14] M. Wortis, in *Phase Transition and Critical Phenomena,* vol.3, eds. C. Domb e M.S. Green, Academic Press, London, (1974)

[15] S. McKenzie, in *Phase Transitions, Cargèse 1980,* M. Levy, J.C. Le Guillou, e J. Zinn-Justin eds.; Plenum, New York (1982)

[16] H. Meyer-Ortmanns, Thomas Reisz, *arXiv: cond-mat/0005412* maggio 2000

[17] L.P. Kadanoff, in collaborazione con W. Götze, D. Hamblen, R. Hetch, E.A.S. Lewis, V.V. Palciauskas, M. Rayl, J. Swift, D. Aspnes, J. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **39**, 395 (1967)

[18] L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944)

[19] M. Kac, J.C. Ward, *Phys. Rev.* **88**, 1332 (1952)

[20] P.W. Kasteleyn, *J. Math. Phys.* **4**, 287 (1963)

[21] H.N.V. Temperley, *Disc. Faraday Soc.* **25**, 92 (1958)

[22] M.E. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 11 (1966)

[23] M.E. Fisher, *J. Math. Phys.* **7**, 1776 (1966)

[24] R.B. Griffiths, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 1479 (1970)

[25] C. Itzykson, *Phys. Rev. D* **11**, 2098 (1975)

[26] C. Itzykson, *Nucl. Phys. B* **210**, 477 (1982)

[27] A.B. Harris, *J. Phys.* **C 7**, 1671 (1974)

Ringraziamenti.

Ringrazio innanzitutto il mio relatore, Prof. Sergio Caracciolo, per l'insostituibile appoggio, scientifico ed umano, fornitomi durante l'intero arco di svolgimento di questo lavoro. È stata inoltre preziosa la collaborazione di tutto il gruppo di lavoro, in particolar modo Andrea Gambassi, Massimiliano Gubinelli, Francesca Maria Marchetti e Andrea Montanari. Ringrazio sentitamente Andrea Gambassi e Massimiliano Gubinelli per le rilevanti correzioni.

Ringrazio il Prof. Massimo Campostrini per le utili discussioni, in particolar modo nell'ambito della Linked Cluster Expansion, nonché i Proff. Franco Strocchi, Ettore Vicari e Claudio Giannessi per i frequenti spunti di riflessione correlati a questo lavoro di tesi.

Ringrazio tutti i miei colleghi che mi hanno aiutato e consigliato nelle varie fasi del processo di ideazione e compilazione, ed in modo particolare Davide Gaiotto, mio ideale "mentore" per quanto riguarda l'approccio ai problemi di spin su reticolo in termini di random walks. Sono riconoscente a Luigi Cantini per il suo sogno premonitore riguardo a mie sensazionali scoperte nell'ambito dei vetri di spin, sogno fatto anni addietro, quando nessuno dei due sapeva cosa fossero (ma chi può dire di saperlo?). Purtroppo anche questa occasione è fuggita!

Ringrazio lo staff del Centro di Calcolo della Scuola Normale Superiore, *in particolar modo gli addetti alla gestione dell'Aula Macintosh, Francesco Mughetti e Alberto Baragatti, per la costante presenza e la disponibilità delle risorse informatiche.*

Ringrazio mio zio Maurizio Amaldi per i suggerimenti ed il supporto di carattere informatico fornitemi durante i miei soggiorni a Siracusa, mia città natale.

In ultimo, ringrazio sentitamente tutti coloro che mi sono stati vicino in tutti questi anni di vita universitaria, con consigli, incoraggiamenti, e soprattutto con la loro amicizia. Sarebbe impossibile dare qui a ciascuno lo spazio che il suo contributo meriterebbe. Sarò perdonato per l'inevitabile incompletezza di questa lista, il cui ordinamento non vuole e non può rispecchiare alcun ordinamento di valore.

Ringrazio i miei genitori, mio fratello Roberto, ed i miei familiari tutti.

Ringrazio i miei amici e compagni di Siracusa, Rosanna, Silvia, Valeria, Livia, Sabrina, Stefania, Ivana, Anna, Paola, Ruggero, Fabrizio, Vincenzo, Vittorio, Tommaso, ed Andrea, e tutti gli altri che purtroppo non ho spazio per citare, ma non di meno sono presenti nei miei affetti.

Ringrazio i miei innumerevoli amici del Carducci, i miei compagni d'anno e colleghi Luigi, Alex, Beppe, John, Stefano, Claudio, Alberto, Livio, Fabrizio, Sandro, e poi Erik, Chiara, Lorenzo, Emmanuelle, Carlo, Charlotte, Aldo, Pamela, Teodoro, Valeria e Vera.